

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

Z-材料模拟、计算与设计
**Z-Materials Simulation, Computation,
and Design**

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



Z. 材料模拟、计算与设计

分会主席：赵纪军、刘利民、陈星秋、范晓丽、陈时友、吕广宏

Z-01

铁弹交替磁体中的自旋反转效应

陆贇豪*

浙江大学

自旋电子学领域对交替磁性的研究热潮正蓬勃兴起。本研究基于对称性分析，首次提出铁弹性与交替磁性之间的新型多铁性耦合机制。通过第一性原理计算，我们预测单层 Janus 四方晶系 V_2OS 材料具备显著特性：利用交替磁体固有的对称性，可通过铁弹性翻转实现自旋极化态调控。值得注意的是，该单层材料磁有序态在室温以上依然稳定存在，且铁弹性翻转能垒可控，展现出巨大的应用潜力。这些发现为二维交替磁性自旋电子学开辟了全新途径，尤其在高密度、低功耗、非易失性信息存储器件领域具有广阔前景。

Z-02

非线性光学下的反铁磁序参量响应和调控

周健*

西安交通大学

反铁磁自旋电子学为新型信息存储和应用提供了新的机遇，与传统铁磁性材料相比，反铁磁材料通常具有半导体型电子学行为，同时具有超快的自旋动力学特征，不易受到外磁场的干扰。然而与此同时，对于常见的共线反铁磁半导体来说，需要寻找新的方法对其序参量（奈尔矢量）进行有效的调控和探测。在本报告中，我们讨论以下非线性光学和反铁磁序参量的关系：（1）尝试讨论非线性光学响应和奈尔矢量之间的关系，通过建立光学响应函数和磁群对称性分析；（2）提出通过光学手段调控磁方向的方案，并且探讨反铁磁材料和交错磁材料在对称性上的不同，预言通过非线性光致磁扭矩的方案实现对这两类材料的区分和表征；（3）我们通过热力学方案讨论光吸收和散射对层状反铁磁材料奈尔矢量反转的过程。

Z-03

层状阻挫体系中磁子轨道角动量产生及其磁频梳应用

邹小龙*

清华大学深圳国际研究生院

携带轨道角动量（OAM）的磁子在磁学、轨道电子学和通信领域具有巨大应用潜力。然而，纳米尺度上该类磁子的可控产生仍然非常具有挑战性。这里，我们提出利用具有中心反演对称性的磁性阻挫薄膜中的斯格明子，可诱导出携带 OAM 的磁子。磁子的 OAM 量子数和磁结构的拓扑荷相对应，并可以通过调节磁各向异性和温度来调控。在反铁磁体系中，我们观察到意料之外的斯格明子霍尔效应，并首次发现自旋轨道矩振荡带来动力学的非线性修正。此外，我们还揭示了磁子 OAM 诱导的新奇物理现象，磁子和斯格明子非线性散射后 OAM 的变化导致不对称的磁子频率梳。基于此，我们提出磁子高频和低频滤波模型。

Z-04

Engineering Chern insulators in two-dimensional ferromagnets

Chengwang Niu*

Shandong University

Chern insulator exhibits rich physics with great interest in both theory and experiment. Here, starting from Chern insulator, we show the emergence of mixed topological semimetals arising from the complex interplay between magnetization direction and momentum-space topology [1]. Moreover, focusing on both the second-order topological and Chern insulators in two-dimensional ferromagnets, we demonstrate that topological phase transitions present an efficient and straightforward way to engineer the orbital Hall effect, where the orbital angular momentum distribution can be controlled by the nature of band inversion [2]. In addition, we show that coupling the nontrivial electronic and magnonic bands allows for the dual Chern insulators, where the Chern insulator and its bosonic analogue, i.e., topological magnon insulator, appear simultaneously within one two-dimensional ferromagnet [3,4]. Both the tight-binding model and Heisenberg-DM model are constructed to demonstrate the feasibility of attaining the dual Chern insulators and point out the perspectives of dual Chern

insulators for spin-orbit coupling and the Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Our findings pave the way to understanding, engineering and utilizing Chern insulators in two-dimensional spin-orbit ferromagnets.

References

- [1] Niu, C.; Hanke, J.-P.; Buhl, P. M.; Zhang, H.; Plucinski, L.; Wortmann, D.; Blügel, S.; Bihlmayer, G.; Mokrousov, Y. *Nat. Commun.* 2019, 10: 3179.
- [2] Chen, Z.; Li, R.; Bai, Y.; Mao, N.; Zeer, M.; Go, D.; Dai, Y.; Huang, B.; Mokrousov, Y.; Niu, C. *Nano Lett.* 2024, 24: 4826.
- [3] Bai, Y.; Zhang, L.; Mao, N.; Li, R.; Chen, Z.; Dai, Y.; Huang, B.; Niu, C. *ACS Nano* 2024, 18: 13377.
- [4] Bai, Y.; Zou, X.; Chen, Z.; Li, R.; Yuan, B.; Dai, Y.; Huang, B.; Niu, C. *ACS Nano* 2025, 19: 9265.

Z-05

二维材料斯格明子相关性质的理论研究

马衍东*

山东大学

Magnetic skyrmions are topological magnetic quasi-particles exhibiting a whirling spin structure, which have been a prominent topic of condensed matter physics since the first experimental observations of skyrmion lattices in bulk non-centrosymmetric magnet MnSi and thin film Fe_{0.5}Co_{0.5}Si. They can be characterized by spins wrapping a unit sphere, carrying an integer topological charge Q that cannot be changed by a continuous transformation of magnetization. Such topological properties ensure the inherent stability which makes them technologically appealing to be used in future spintronics for information storage and processing. Magnetic skyrmions have been observed experimentally in various bulk and thin film systems. Recently, with the discovery of ferromagnetism in two-dimensional lattice, exploiting magnetic skyrmions in two-dimensional magnetic crystals is at the frontiers of condensed matter physics and material science. In this talk, I will introduce our recent works in this field.

Z-06

二维磁性材料拓扑物性预测与调控

张卫兵^{*1}、李树宗²

1. 长沙理工大学

2. 长沙理工大学

二维磁性材料展现出丰富的拓扑物性，在未来自旋电子学中具有重要的应用前景。预测并调控新型拓扑物态具有重要意义。我们结合唯象理论模型、第一性原理计算和紧束缚模型等方法，在二维蜂窝结构体系中预测了两种不同前驱态的量子反常霍尔绝缘体 CeX ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 和 1T-PrN₂。研究发现其拓扑性质可通过磁化方向进行有效调控。通过称性分析和紧束缚模型构建，我们揭示了这些磁性单层中非平庸能带结构的机理。

此外，我们还预测了一种具有 C_n-旋转对称性的磁性二阶拓扑绝缘体 1T-NiCl₂。该材料在两个自旋通道中均具有非平庸分数电荷的 C₃-对称的角态。进一步研究发现，施加垂直电场后，双层 1T-NiCl₂ 的角态呈现出层极化和自旋极化的特征。更重要的是，在层间反铁磁基态下，反转电场方向可同时翻转角态的层和自旋极化方向。这种电场诱导层极化的角态，不依赖于二阶拓扑绝缘体的具体类型及层间磁构型，具有普适性。这一发现为设计具有层极化角态的二维二阶拓扑绝缘体提供了新思路。

Z-07

磁电拓扑

董帅*

东南大学

过往凝聚态物理中拓扑和磁电是两个独立的分支。过往的拓扑物理研究主要包括动量空间能带结构的拓扑，以及实空间矢量场的织构拓扑。我们最近在磁电耦合方面做了一些理论尝试，在磁电体系中揭示了相空间的拓扑，可以实现精准的磁电调控。

- [1] Z.W. Wang, Y.S. Chai, S. Dong, *Phys. Rev. B* 108, L060407 (2023)

[2] Y. Zhou, H.S. Ye, J.T. Zhang, S. Dong, **Phys. Rev. B** 110, 054424 (2024)

[3] H.W. Wang, F. Wang, M. Yang, Y.T. Chang, M.Y. Shi, L. Li, J.-M. Liu, J.F. Wang, S. Dong, C.L. Lu. **Phys. Rev. Lett.** 134, 016708 (2025)

Z-08

Transition from Antiferromagnetism to Altermagnetism: Symmetry-Breaking Theory

Lizhong Sun*, Pan Zhou

Xiangtan University

Considering the similarity of the real-space configurations for the opposite spin sublattices in both antiferromagnets (AFM) and altermagnets (AM), the relationship between them should be profound. In this Letter, we demonstrate that AFM and AM can be connected with spin groups and their subgroups. Consequently, the breaking of the combined inversion or translation operation with time-reversal symmetry (PT or tT) in AFM will induce phase transition from AFM to AM. Moreover, we propose that Floquet engineering using circularly polarized light and surface cutting engineering are effective approaches to break PT and tT symmetries of AFM, respectively, achieving the phase transition. Furthermore, as for specific two dimensional AFM systems, pure electric field is a feasible approach to induce the phase transition and modulate their charge-spin conversion ratio. Our work not only establishes a theoretical framework for the phase transition from AFM to AM but also provides practical approaches utilizing the achievements in AFM for a hundred years to obtain AM, significantly expanding the scope of altermagnetic materials for both theoretical studies and future practical applications.

Z-09

可调控的多态极化反铁磁体

谢林均、陈晓芳、齐景山*

天津理工大学

交错磁体中动量依赖的非相对论自旋分裂是由晶体对称性决定的，因此很难调控特定材料的自旋分裂。具有可调类铁磁性非相对论自旋分裂的反铁磁体的发现和设计对基础科学和实际应用都具有重要意义。在这项工作中，我们提出了多态极化反铁磁体，它将多个极化态和反铁磁序耦合起来，从而实现了可调的类铁磁自旋分裂。为了实现多极化态，我们提出了一种对称设计概念，考虑了两个因素：铁电性用于打破空间反演对称性和低界面对称性用于在滑移势能面上形成多势阱。基于这两个考虑，我们选择了具有平面外极化和上下表面不同原子排列的位移型铁电层状材料。例如，在位移型反铁电 Nb₃I₈ 双层中，两个相反的滑动铁电态引起相反的自旋分裂，实现了自旋极化的非易失性电场控制。此外，在位移型铁电双层中，位移型铁电和滑动铁电可以共存。由于自发破坏的空间反转对称性和低界面对称性，获得了具有适当过渡势垒的多个极化态。考虑到位移型铁电和滑动铁电之间的耦合，可以存在八个极化态，对应于不同的自旋分裂。因此，在多态极化反铁磁中可以实现整个布里渊区的非易失性电场可控铁磁性自旋分裂，为未来基于多极化态和可调自旋极化的多态信息存储和多功能自旋电子器件提供了强有力的理论支持。

Z-10

零维基元组装材料的滑移铁电和巨大激子效应

高威帷*¹、张凡³、张培鸿⁴、赵纪军²

1. 南京大学 原子制造研究院

2. 华南师范大学 物理学院

3. 大连理工大学 物理学院

4. 纽约州立大学布法罗分校 物理学院

零维基元组装材料包括由团簇、多原子离子、以及分子等零维结构基元结合而成的物质体系。零维基元电子态的局域性以及基元间丰富的相互作用导致了許多非常规的物理性质。我们计算研究了两类典型的零维基元组装材料，发现：（1）富勒烯组装的二维材料存在丰富的结构多态性，且三层及三层以上的六方晶二维富勒烯存在滑移铁电效应。（2）空位有序双钙钛矿半导体（一般化学式为 A₂BX₆）出现类似于分子晶体中的 Frenkel 激子，并表现出 1 eV 量级的激子结合能（超过了典型二维半导体 MoS₂）。（3）空位有序钙钛矿材料易合成为多元混合物，且具有高度可调节的光学和电子结构性质。针对多元混合钙钛矿体系物

性高效预测的挑战，开发了基于图神经网络的模型，编码混合材料体系中的混合位点信息，无需优化晶体结构即可高效预测多元混合钙钛矿的物理性质。

Z-11

低维磁性量子材料的理论设计

付会霞*

重庆大学

本报告基于第一性原理和有效模型模拟，围绕二维 Mn 基磁性拓扑体系的理论设计展开研究。在二维磁性体系 MnBi₂Te₄/CrI₃ 异质结中，借助界面处强超交换作用(约 40 meV)有效固定住 MnBi₂Te₄ 的磁性，实现零磁场量子反常霍尔效应，并通过较小电场调控实现高陈数拓扑态。在 MnBi₂Te₄/MnBr₃ 异质结构中，通过电子关联效应的调控，实现层间强弱耦合的转换，提出一种提高磁转变温度的新策略。此外，基于具有高磁性温度的 MnBr₃ 陈绝缘体材料，研究发现铁磁态下的 MnBr₃ 双层体系表现出量子反常霍尔效应特征，包括量子化霍尔电导和磁光效应；而在反铁磁堆垛结构中则实现了电场或光场可控的层霍尔效应及高阶拓扑角态，为新型拓扑自旋器件的设计提供了理论基础。

Z-12

探索新的铁电性和磁电耦合机制研究

逯学曾

东南大学物理学院

摘 要：从多铁性概念提出至今已有 30 多年，各种形式的多铁材料不断被发现。比较典型的有第一类多铁材料和第二类多铁材料，它们分比以 BiFeO₃ 和 TbMnO₃ 为代表。目前为止，室温的、强铁电的、强铁磁的，具有强磁电耦合的单相多铁材料依然是探索新材料的重要目标。然而，将铁电性和磁性融合到一起并非一件易事。当铁电性和磁性的来源不同时，通常会导致较弱的磁电耦合性，这也是第一类多铁材料的缺点。在我们的工作中，首先通过对无机 Ruddlesden-Popper (RP) 卤化物和硫化物的研究，发现了不同于 RP 氧化物的铁电设计规律，可以实现克服退极化场的、超薄铁电和强磁电耦合多铁材料。其次，我们的工作基于交错磁性铁电性的融合，即，交磁多铁材料，提出了第一类多铁中普遍存在的磁电耦合机制。

关键词：交错磁性，多铁性、磁电耦合性、第一性原理计算

*Email: xuezenlu@seu.edu.cn

Z-13

拓扑材料的机器学习研究与创制

翁红明

中科院物理所

Z-14

第 IV 族拓扑材料的输运及器件设计的计算研究

彭向阳*、刘文超

湘潭大学 物理与光电工程学院

拓扑绝缘体因具备受拓扑保护的金属边缘态而具有优异且稳定的导通性，但由于没有带隙而难以实现逻辑开关运算。基于对第 IV 族单质拓扑绝缘体输运特性的研究，发现在块体能带区域的态分布在条带内部，其电导容易受缺陷的影响，而边缘态的能量在块体的带隙内且分布在条带边缘，几乎不受条带内部缺陷的影响。基于此我们设计了能量介于块体态和边缘态的拓扑绝缘体开关，通过在条带内部引入扰动，显著破坏块体态的导电性，而不影响边缘态的导电性。当偏压使能量处于块体能量区时，条带内电子输运被阻断，而当偏压使能量处于边缘态区域时，电子可以几乎无损耗传输，由此可在拓扑绝缘中实现开关逻辑运算。研究发现，简单在条带内引入空位缺陷可以实现开关，但开关比比较低。而在条带内部引入矩形槽，可以几乎完全阻断块体电子的传输，使开关比大幅提高至 105。同时在矩形槽边缘引入锯齿形缺口，可以削弱共振，显著提高开关比和稳定性。与单槽相比，研究发现双槽具有更高的开关比和更稳定的开关性能。优化槽尺寸和间距后，开关比达到 109。改变槽间距，发现开关比呈现有趣的准周期方式振荡。研究结果对拓扑绝缘体开关器件的设计提供了思路。我们还设计了一种自旋-能谷器件。研究发现，第 IV 族类石墨

烯材料的锯齿条带中可呈现不同的量子霍尔态，调整外电场可引起不同量子霍尔态之间的相变。当外电势小于本征自旋轨道耦合强度时，体系呈现量子自旋霍尔(QSH)相，超过时则呈现量子能谷霍尔(QVH)相。将不同的 QVH 体系组合，可以构成量子能谷霍尔组结(QVHK)。进一步研究了磁性和非磁性安德森无序对体系的输运影响，发现 QSH 相对非磁性无序是稳健的，而对磁性无序是脆弱的，QVHK 体系对非磁性和磁性无序都具有较好的稳健性。我们设计了一种 QSH-QVH 结构的自旋-能谷器件。计算表明，调控外电场可实现边缘电流的能谷和自旋极化，呈现丰富的量子状态，并且对磁性和非磁性无序具有较好的稳健性。发现可以通过弱磁性掺杂，抑制 QSH-QVH 异质结中的 QSH 电流，而能谷电流不会受到显著影响，从而在端口获得极化的能谷电流。因此可以施加外电场，动态调控体系的能谷极化状态。

Z-15

双层系统中实现交变磁相的一般性堆垛方案

周攀

湘潭大学

本工作中我们提出了双层系统中实现交变磁相的一般性方案。此方案系统地揭示了双层系统中交变磁性的产生条件，提供了从单层材料的层群出发，预测双层系统中交变磁性是否出现的标准。研究表明，七个特定的双层点群能够有效保护交变磁性的产生，分别为 C2, D2, D3, D4, D6, D2d 和 S4，通过对称性约束实现该磁性相的稳定性。基于此，研究提出了两类构建双层系统的堆叠算符，分别为转角堆叠算符和常规晶体点群中的对称性堆叠算符。因此，交变磁性不仅可以在转角双层反铁磁结构中实现，还可通过对称性直接堆叠的方式获得。结合第一性原理计算，本文以转角双层 CrBrSe 和双层 NiZrI6 为例，验证了通用堆叠理论的有效性。CrBrSe 的单层层群为 L46，转角堆叠后双层系统点群为 D2，计算表明其能带结构在特定高对称路径上展现交变磁性的自旋劈裂。NiZrI6 的单层层群为 L67，对称性堆叠后双层系统点群为 D3，其能带结构同样在高对称路径上表现出交变磁性自旋劈裂。D2 和 D3 均为理论中预言的七个点群之一，这与通用堆叠理论的预测完全吻合。这一研究为探索双层系统中的交变磁性提供了理论支持，并为未来实验提供了可行的设计方案。

Z-16

A first-principles study of nickelate superconductors

陈航晖

NYU Shanghai and New York University

Z-17

自插层磁性体系拓扑性质的理论探究

侯玉升

中山大学物理学院

磁性拓扑器件因其高效的自旋调控、低能耗以及抗干扰的特性，已成为自旋电子学领域的前沿研究方向。由于其性能高度依赖于磁有序与拓扑物性的协同调控能力，因此筛选出具有高磁转变温度、拓扑物性可调控的新型磁拓扑材料是目前的研究重点。对比层状范德华磁体，自插层磁性体系凭借独特的插层结构，为探索高性能的磁性拓扑物性耦合提供了新平台。研究和揭示自插层体系中磁有序与拓扑能带演化的内在关联规律，并阐明高磁转变温度及拓扑鲁棒性的调控机制，不仅对高性能磁拓扑器件的应用有着重要发意义，也为理解磁性拓扑耦合的微观机制提供了新视角。

基于第一性原理计算，我们预测两类具有 $\text{Mn}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$ 型自插层结构的拓扑磁性体系。我们的研究结果表明，这两类拓扑磁体具有高磁转变温度以及自旋调控的拓扑物性。在锆基自插层磁体中，我们发现了一种亚铁磁节线半导体 $\text{Te}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$ 。该体系由于层内与层间的强磁阻挫耦合，具有出 268 K 的高磁转变温度。除此之外，其受晶体对称性保护的拓扑节线态可以通过自旋取向的调控从而实现金属绝缘体转变，并且这一现象在双位点掺杂的操作下可以进一步实现近室温、宽带隙的特性[1]。在另一类铬基自插层磁体中，我们发现了室温铁磁金属 $\text{Cr}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$ [2] 和 $\text{Cr}_3\text{Ge}_2\text{Te}_6$ [3]。其中 $\text{Cr}_3\text{Si}_2\text{Te}_6$ 展现出更为优异的拓扑节线与外尔点共存的自旋半金属特性，通过改变自旋取向可以显著地调控体系的拓扑节线与外尔点，进而产生由贝里曲率主导的本征巨反常霍尔效应。我们的研究表明，这些自插层磁性拓扑材料在自旋电子器件方面可能具有潜在的应用前景。

Z-18

二维范德华磁性拓扑材料的理论设计与相关量子特性的调控研究

李杰

上海大学量子科技研究院

拓扑材料，特别是磁性拓扑材料，作为一个具有内部绝缘、界面/边缘导电特性的量子材料自被发现以来，就在凝聚态物理、自旋电子学、材料科学等领域引起了极大的关注，其中一个重要的研究方向是设计真实可行的磁性拓扑材料以及实现对其拓扑量子态的有效调控。报告人基于二维范德华异质结材料具有可集多种量子特性于一体的潜在特性，通过结合模型设计与第一性原理计算等方法提出了几种二维范德华磁性拓扑材料，实现了通过调节铁电衬底、外加电场、外加压力等方式分别对相应的磁性拓扑特性进行有效的调控。这进一步丰富了磁性拓扑材料的研究，为实验上实现量子反常霍尔效应的调控提供了新的思路。

Z-19

Composition-controllable Topological Nodal-line Semimetals in Honeycomb Disilabenzene-linked Covalent Organic Frameworks with Six-band ModelsXinyong Cai^{1,2,3}, Jun Zhou², Panlong Kong⁴, Wencai Yi⁵, Yuxiang Ni¹, Yuanzheng Chen¹, Hongyan Wang^{*1}

1. Southwest Jiaotong University

2. Agency for Science, Technology and Research

3. Xihua university

4. Jingchu University of Technology

5. Qufu Normal University

Covalent organic frameworks (COFs) are mainly normal insulators characterized by composite band models above and below the Fermi level. To introduce a strategy for creating COFs with unique topological states based on the composite band models, we rationally design the first topological nodal-line semimetallic COF (i.e., HBAF-COF) based on a recently synthesized precedent. Topology and frontier molecular orbital analysis reveal that N-containing heteroacene/acene-linked COFs typically exhibit an inherent diatomic face-to-face Kagome band model, a six-band structure. First-principles calculations show that the coupling effect between pyridinic-N atoms and the Si-Br units facilitates the topological semimetallic phase transitions in the band model of HBAF-COF. More importantly, the Si-Br unit also enables composition-controllable semimetal with the six-band model in the disilabenzene-linked COF without N atoms. The discovery of the Si-Br-induced topological phase transition in the six-band model offers an approach to transforming normal insulating COFs into non-trivial semimetal states with composite band models.

Z-20

Data-driven design of quantum anomalous Hall insulators

张助华

南京航空航天大学

Z-21

二维材料中的反常谷霍尔效应和量子反常霍尔效应

任俊峰

山东师范大学

作为具有优良物理性质的不同于电荷和自旋的新颖自由度，能谷有望成为未来电子学中用于信息存储、处理的新的载体。采用合适有效的方法来诱导材料产生能谷极化并对其进行有效调控是实现反常谷霍尔效应（AVHE）的前提。另一方面，量子反常霍尔效应（QAHE）因其奇异的拓扑性质在新型量子器件中具有广阔的应用前景。寻找在高温下工作且具有更高量子化平台 QAHE 的新型拓扑材料是当前凝聚态物理最具挑战性的课题之一。报告主要介绍我们为了解决以上关键问题所取得的部分研究进展。我们采用理论模型与计算模拟相结合的多尺度研究方法，充分考虑六角、四方晶系的结构特点，系统研究了二维材料中的 AVHE 和 QAHE，为新型低能耗电子器件的制备和应用提供理论支撑。

Z-22

Intrinsic Altermagnetism and Possible Triplet Superconductivity in $A_y\text{Fe}_{2-x}\text{Se}_2$

曹超

浙江大学

Z-23

低维磁性体系中体光伏效应的研究

张春梅

西北大学

体光伏效应作为一种二阶非线性光学响应,在均匀光照下非中心对称体系中可以产生稳定的电流。体光伏效应由体系对称性决定,基于第一性原理计算和有效哈密顿模型,我们研究了磁构型对体光伏效应的影响,研究发现 (i) 在共线反铁磁体系中,自旋方向和电偶极矩可以实现对体光伏效应的有效调控。我们通过哈密顿模型以及第一性原理计算,在磁性滑移铁电材料中实现了奈尔矢量方向对体光伏的调控,且层间滑移可以反转面内光电流的方向[1]。(ii) 在非共线磁的情况下,磁结构可以打破中心对称体系的对称性,带来体光伏效应。我们通过磁点群对称性分析和紧束缚近似模型,在三角格子中说明 proper screw 和 cycloid 两种常见的螺旋磁构型可以带来不同的磁点群,以及不同的体光伏效应。我们在单层磁电耦合体系 NiI_2 中进一步说明以上问题[2]。另外,体光伏效应由布洛赫波函数决定并与电子波函数的几何相位如贝利联络和贝利曲率有内在联系,因此体光伏效应可以作为检测电子拓扑特性的工具。我们还研究发现了(i)拓扑相变与体光伏效应中移位电流项之间的关系[3] (ii) 基于弗洛凯调控和体光伏效应,我们首次实现了全光调控以及探测拓扑相变的手段[4]。

参考文献:

[1] C. Z., P. Guo, J. Z., Tailoring Bulk Photovoltaic Effects in Magnetic Sliding Ferroelectric Materials. Nano Lett. 22 (2022) 9297

[2] C. Z., H. Pi, J. Z., Bulk photovoltaic effects in helimagnets. Phys. Rev. B 110 (2024), L041104

[3] C.Z, H.P, L.Z, S.L., J.Z, H.W., Switchable topological phase transition and nonlinear optical properties in a ReC_2H monolayer. Phys. Rev. B 109 (2024) 125101

[4] M.Y., X.M., S.L., J.Z., C.Z., Driving and detecting topological phase transition in noncentrosymmetric systems via an all-optical approach. Phys. Rev. B 105 (2022) 245108

Z-24

Altermagnetism 诱导的 RuO_2 轨道霍尔效应新现象

张力舒

山东大学

近年来, RuO_2 作为理解交换劈裂共线反铁磁体(现称为 altermagnet)基本物性的关键材料而备受关注。然而,关于 RuO_2 是否具有磁性的研究报道存在矛盾。本研究发现,与先前认为 RuO_2 具有 $\sim 0.05\mu\text{B}$ 的 Ru 磁矩并呈现反铁磁(AFM)序的结论不同,其块体晶体实际上并不表现出 AFM 序。此外,早期工作指出磁自旋霍尔效应对 RuO_2 中自旋流的产生起重要作用。在本工作中,我们基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算,探究了这种名义上的 altermagnetic 化合物中磁性对轨道霍尔效应的影响。通过调节 DFT 中的 Hubbard U 修正,我们发现电子-电子关联作用会显著影响 RuO_2 的磁性,使其随 U 值增大从非磁性态转变为 altermagnetic 态。进一步计算表明, RuO_2 块体在非磁性和磁性相变过程中的自旋与轨道霍尔电导存在显著差异。我们的结果揭示了 RuO_2 中轨道霍尔效应与 altermagnetism 的出现之间存在非平庸的关联。这些发现为理解 RuO_2 的磁性和输运性质提供了新视角,并为探测该材料中的 altermagnetism 提供了新方法。

Z-25

二维交替磁体的理论设计

刘芹茜¹、蒋雪^{*2}、赵纪军³

华南师范大学

自旋电子学器件以电子自旋作为信息载体,具有非易失、高密度、低功耗、高速等优势,有望替代传统电荷电子学。最近,人们发现了一类特殊的交替磁体,兼具了铁磁和反铁磁材料的优点,虽然不呈现宏

观磁性，却可以在非相对论极限下表现出动量依赖的自旋极化行为，能够在其中观察到自旋极化电流、反常霍尔效应、反常能斯特效应等现象。基于第一性原理计算和蒙特卡洛模拟，在原子水平上设计了两类具有交替磁性的二维材料 MX 和 M_2Te_4 ($M=Mn, Fe$)。阐明了晶面、维度和衬底效应对 NiAs 型磁性材料中交替磁性的调控规律，揭示了二维交替磁体 FeX 中反常磁热效应的微观物理机制。同时，在二维五边形材料 M_2X_4 中实现了交替磁性，并通过金属原子中 3d 电子与 Te 原子 p 电子之间的杂化与较强的自旋轨道耦合作用在费米面附近形成一系列的狄拉克点，从而诱导出较大的贝瑞曲率，在 Mn_2Te_4 体系中实现较大的反常能斯特效应。

Z-26

金属材料损伤机制的预测模型构建

高旺

吉林大学

抗损伤能力对金属材料实际应用至关重要，其高度依赖于缺陷键合性质，但是组元成分、合金类型和缺陷配位环境的多样性限制了对缺陷键合的材料基因挖掘，从而阻碍了金属抗损伤能力的提升。通过量化原子成键规律，我们以元素基本性质为自变量，建立了合金点缺陷稳定性和扩散性能、金属表面能和吸附能、以及金属强度和晶界溶质偏析能的定量预测模型，用于抗损伤合金设计。这些基于易获取参数的解析模型，既提供了理解金属损伤机制的坚实物理图像，又提供了可靠的抗损伤合金设计理论工具。

Z-27

纳米孪晶铜的抗辐照微观机理研究

谢红献^{*1}、孙刘辉²、袁大祺³

1. 河北工业大学

2. 河北工业大学

3. 河北工业大学

纳米孪晶面心立方金属具有优异的抗辐照性能，但减轻其辐照损伤的内在机制仍存在争议。本研究采用分子动力学模拟方法，系统地研究了 $\Sigma 3\{112\}$ 非共格孪晶界 (ITB) 对纳米孪晶铜抗辐照性能的影响。模拟结果表明，层错四面体和间隙位错环等辐照缺陷很容易被吸收到迁移的 ITB 中。且这两种缺陷分别占据了 ITB 中两种不同类型的原子层，并在彼此相反的方向移动，当运动到较近距离时，间隙子会跳到空位所在的原子层导致它们相互湮灭，从而消除晶体中因辐照而产生的缺陷、增强了纳米孪晶铜的抗辐照性能。另一个有趣的发现是，间隙和空位型缺陷都可以加速而不是延缓 ITB 的迁移。上述模拟结果进一步从缺陷形成能和迁移能方面得到了证实。本研究进一步加深了对纳米孪晶金属抗辐照损伤机制的认识。

参考文献: Hongxian Xie*, Liuhui Sun, Tingting He, Guang-Hong Lu*, The effect of migrating $\Sigma 3\{112\}$ incoherent twin boundary on radiation tolerance of nanotwinned copper, Acta Materialia, 2024, 266:119668

Z-28

塑性应变局部化程度的定量度量研究

潘志亮^{*1}、段鹏²、Frederic Sansoz³

1. 桂林电子科技大学

2. 桂林电子科技大学

3. University of Vermont

塑性应变局部化是固体材料延性失效的先兆，其失效概率随应变局部化程度加剧而增大。然而，目前对于局部化程度的评估基本局限于定性分析，即使分析基于量化的应变分布，因而这种评估缺乏足够的实际指导意义。本研究受到多个同号点电荷聚集导致电势能升高的物理现象启发，创新性地提出一种基于塑性应变空间分布的定量评估应变局部化程度的策略——将各位置应变值等效为点电荷，通过分析应变场的空间聚集情况来量化局部化严重程度。该策略不仅能有效量化各种模拟应变分布试样的局部化程度，还能够量化掺杂铜或者镍的纳米结构银在变形过程中的应变局部化严重程度：纳米结构银中掺杂铜时促进应变局部化，而掺杂镍时则抑制应变局部化。更重要的是，对比研究这两种合金表明该策略还可以精准识别潜在的应变局部化机制——不仅能识别基于应变场观察到的显而易见的机制，还可揭示传统方法易忽略且难以检测的隐藏机制。本研究通过建立应变局部化的定量表征方法，表明塑性变形的应变场蕴含远比传统认

知更丰富的信息，并为识别变形/失效机制、挖掘各种关键信息提供了高效途径。

Z-29

多相高熵耦合陶瓷热应力场中的裂纹扩展

王学智^{*1}、陈政望²、车军伟³、刘向阳⁴、令狐佳珺⁵

1. 长安大学理学院
2. 长安大学理学院
3. 西安科技大学理学院
4. 清华大学材料学院新型陶瓷与精细工艺国家重点实验室
5. 长安大学理学院

研究发现高熵耦合陶瓷在高温环境下裂纹扩展与稀土元素阳离子的掺杂有关。Ce 和 Eu 能够提高钕镧酸盐涂层的断裂韧性，而 Nd 和 Sm 则增强了其刚度。在裂纹扩展过程中，不同浓度的 Yb 导致微孔结构的形成，从而减缓了其扩展过程。而界面层的变化表明，掺杂稀土阳离子在一定程度上可以抑制键的断裂。

Z-30

氮化铀燃料中点缺陷与 Xe 原子行为的第一性原理研究

刘智骁^{*}

湖南大学

氮化铀陶瓷燃料因其高铀密度、高熔点和高热导率等成为新型裂变反应堆燃料的研究热点。同传统的氧化物燃料一样，氮化铀燃料也面临着辐照损伤以及裂变气体 Xe 团聚成泡问题带来的服役性能退化。本工作采用第一性原理计算的方法，系统的研究了 UN、U₂N₃ 和 UN₂ 中典型辐照点缺陷和 Xe 的占位、扩散以及团聚行为。

通过对比不同氮化物相中缺陷的形成能发现，随着铀氮比的降低，U 空位的形成能逐渐升高，N 空位的形成能逐渐降低，U 间隙形成能降低，N 间隙形成能升高；同一化合物中，间隙原子半径越大，形成能越高；空位对 Xe 原子有很强的捕获能力，少数由 N 构成的哑铃状原子对也可捕获 Xe 原子。

采用 CI-NEB 算法计算了典型辐照点缺陷的扩散势垒，发现随着铀氮比的下降，铀氮燃料中空位、间隙原子以及 Xe 原子的扩散能垒总体呈下降趋势，点缺陷扩散变得更容易。但究其本质，是因为随着铀氮比的增加，其晶体结构的密堆程度下降，使得点缺陷周围的空间位阻减小，从而有利于其的扩散。

探索了不同氮化物中 Xe 的初期形核机制，发现 UN₂ 中最容易形成 Xe 团簇，即使在完整的 UN₂ 晶格中，Xe 也能以相对容易的方式在其间隙位聚集为团簇，而随着铀氮比的提高，Xe 在铀氮燃料（U₂N₃, UN）的完整晶格中溶解和聚集的难度大幅提高，表现在结合能数值的降低和晶格畸变程度的加大。只有当这两种燃料的晶格内部已经形成空位团簇时，Xe 原子才有机会在其中溶解和聚集。

Z-31

以弛豫能作为快速评估材料缺陷工程中掺杂可行性的描述符：在 Lu₂SiO₅ 掺杂筛选中的应用

崔宇^{1,2}、孙雪娇^{1,2}、孙宜阳^{*1}、高峰²

1. 中国科学院上海硅酸盐研究所
2. 长春师范大学

闪烁材料的开发通常需要在缺陷工程上投入大量精力。当前迫切需要一种快速筛选潜在掺杂元素的方法。硅酸镧（Lu₂SiO₅, LSO）是一种在核医学、公共安全和高能物理领域广泛应用的闪烁材料。研究表明，钙（Ca）掺杂和铝（Al）掺杂可有效增强铈（Ce）掺杂 LSO 的闪烁性能。为进一步推进此类方法，预期通过第一性原理计算辅助缺陷工程。然而，直接计算缺陷形成能的过程较为复杂。本文提出以掺杂元素在基质晶格中的“弛豫能（relaxation energy）”作为缺陷形成能的描述符。该参数适用于高通量计算。研究筛选了 32 种元素作为 LSO 的潜在掺杂元素，并分析了这些元素替代 Lu 位和 Si 位的难易程度。针对 15 种掺杂情况，直接计算了缺陷形成能并与相应的弛豫能进行对比。结果表明，弛豫能可作为上述目标的可靠指标。该描述符有望在 LSO 及其他无机非金属材料（例如共掺杂体系）的大规模缺陷工程筛选中发挥更重要的作用。

Z-32

磁性弗里德尔振荡导致的 Fe/Cu 界面二维合金化

耿文通

浙江师范大学物理系

Copper precipitation is widely used in steel engineering, but the nanoscale size of early-stage Cu precipitates makes determining their composition experimentally challenging. The late Professor Morris Fine highlighted the puzzling discrepancy between the low solubility of Fe in bulk Cu and the surprisingly high Fe content in Cu precipitates revealed by atom probe tomography. Using rigorous first-principles density functional theory calculations, we systematically search for stable Fe/Cu interfacial structures and find no diffuse atomic layer in the [110] orientation, a single diffuse layer at the (001) interface, and up to two diffuse layers in the [111] direction. Magnetic Friedel oscillations drive two-dimensional alloying at the (001) interface, while configurational entropy governs alloying at (111). These interfacial alloying effects explain the significant Fe content observed in nanoscale Cu precipitates. Further calculations show that this alloying substantially alters impurity segregation at the (001) interface. In particular, enhanced hydrogen trapping at the interface suggests that Cu precipitates may help mitigate hydrogen embrittlement in steel. Our study provides a quantum-mechanical understanding of chemical mixing at interfaces and offers valuable insights for the design of structural alloys at the atomic scale.

Z-33

金属玻璃的反常原子结构与韧脆转变

蒋元祺

南昌师范学院

近年来, 为了改善非晶合金的玻璃形成能力, 提高金属玻璃的韧性, 人们对液态金属的非平衡凝固与金属玻璃断裂行为的物理机制进行了大量的研究。然而, 目前仍有许多悬而未决的科学问题。在 2023 至 2025 年的工作中, 我们一方面以液态金属 Ta 的非平衡凝固过程为研究对象, 发现自由 Ta 团簇的基态几何结构对其形核早期的原子结构演化起着重要作用, 解释了为什么当以 1×10^{10} K/s 的速率冷却时, 六角密堆 (HCP) 原子团簇在 Ta 中占据主导地位(Yuanqi Jiang, et.al, Vacuum 216 (2023) 112423), 并且导致径向分布函数第一峰随着温度的降低出现反常扩展(PCCP,2025,DOI:10.1039/D5CP00247H; CrystEngComm,2025, DOI: 10.1039/D5CE00420A); 另一方面, 针对 Al (基) 与 Fe-P 金属玻璃在极限应力条件下, 其无序原子结构的晶化、裂纹的扩展以及孔洞的形成等重要科学问题进行了深入研究, 结果表明 Al 基金属玻璃在拉伸时会逐渐晶化。晶化会形成大量不同取向的 FCC 晶块, 而这些 FCC 晶块之间存在的由大量无序高熵原子形成的 HCP 晶界是拉伸后期 Al 基金属玻璃发生灾难性断裂的最重要诱因之一(Yuanqi Jiang, et.al, JMR&T 2023;26, 8997-9008)。

Z-34

Fe-Cr-Ni 中熵固溶体合金的团簇式结构单元构建与第一性原理计算验证

张爽*、李平平、张佰豪、刘超前、邹存磊、赵亚军、董闯

大连交通大学

固溶体合金的第一性原理计算需要合适的结构建模, 以提升精度和减少计算量, 但是目前最大的难点在于缺少固溶体物理结构模型, 尤其目前的固溶体理论无法处理多主组元的高熵型固溶体合金。本文以工业合金的三元基础体系 Fe-Cr-Ni 为研究对象, 应用团簇加连接原子模型, 结合第一性原理计算研究了接近等比例的 16 原子成分式 $\text{Fe}_6\text{Cr}_5\text{Ni}_5$ 的原子构型。参照元素之间的混合焓, 构建了理论上最稳定的团簇式局域结构 $[\text{Ni-Cr}_5\text{Fe}_6\text{Ni}_1]\text{Ni}_3$, 预测该结构应尽可能多地存在于 $\text{Fe}_6\text{Cr}_5\text{Ni}_5$ 中熵固溶体合金中。应用 VASP 软件实施计算, 构建面心立方结构 $2 \times 2 \times 1$ 的超胞, 设置平面波截断能 500 eV, K 点网格 $3 \times 3 \times 6$, 使得两步间的总能量变化小于 $1\text{E-}6$ eV, 原子位置通过共轭梯度法充分弛豫, 直到晶胞中每个原子的受力均小于 0.01 eV/Å。比较各种可能构型, 首先根据混合焓判断 Ni 原子优先占据中心原子位置, 构建连接原子为 Ni3 及 (Fe, Cr, Ni)混合的不同结构, 计算得到中心和连接原子均为 Ni 时能量更低。然后, 将连接原子固定为 Ni3, 构建中心原子分别为 Fe、Cr、Ni 的不同结构, 再次得到中心和连接原子均为 Ni 时能量更低。由此可以得到推论, 中心和连接原子相同时, 壳层原子混乱度最高, 结构能量相对更低。进而构建中心和连接原子同

为 Fe、同为 Cr、同为 Ni 的不同结构，计算结果仍然显示中心和连接原子均为 Ni 时能量更低。最后，补充计算了没有团簇加连接原子模型嵌入的结构，即同类元素出现不同程度偏聚的情况，计算结果显示其能量更高。经过 43 组计算后，确定出最稳定结构中以 Ni 原子为中心的局域结构由 $4[\text{Ni-Fe6Cr5Ni1}]+1[\text{Ni-Fe4Cr4Ni4}]$ 组成，符合团簇式结构单元思想的理论预测。基于最稳定结构，获得了该合金的晶格常数 3.558 Å，杨氏模量 259 GPa，与实验结果 3.595 Å 和 219 GPa 接近。本文提出了一种筛选最稳定原子排布模式的新方法，并通过与实验结果的对比分析，验证了团簇式结构单元的合理性，为理解复杂的高熵合金的原子排布特征提供了简洁的建模方法。

Z-35

基于密度泛函理论和统计热力学模型的抗氢钢计算设计研究

王海涛*、仇浚润、韩恩厚

广东腐蚀科学与技术创新研究院

氢能作为清洁可再生能源，在未来能源体系中占据关键地位。然而，氢在存储、运输过程中，广泛应用的高强钢面临着氢脆问题，导致材料力学性能下降、脆性断裂，甚至引发灾难性失效，成为制约氢能推广的核心挑战之一。在此背景下，计算材料学为理解氢脆机理、优化合金成分提供了强有力的工具。我们通过密度泛函理论计算结合统计热力学模型，研究了气体氢 H₂ 和超临界氢 s-H₂ 在掺杂各种合金元素(Al、Co、Cr、Cu、Mn、Mo、Nb、Ni、Si、Ti、V、W、Zr) 的 Fe 基合金表面的解离吸附行为，探索了不同温度和压力下多元合金耦合作用对 H₂ 解离吸附热力学特性的调控机制。计算表明温度和压力显著影响了 H₂ 解离吸附的热力学行为，压力的增加有利于氢的解离吸附，温度呈现两种相反的效应，温度的升高抑制低压气态 H₂ 吸附而促进高压超临界氢 s-H₂ 吸附。合金元素的掺杂对 H₂ 解离吸附热力学特性产生了重要影响，Al、Co、Cr、Cu、Mo、Nb、Ni、Si、Zr 合金元素增强了 H₂ 解离吸附的热力学驱动力，其中 Al、Si 的驱动力最大，Mn 能降低 H₂ 解离吸附的热力学驱动力，而 W、V、Ti 影响不显著。合金元素的耦合效应显著改变了 H₂ 解离吸附的热力学特性，Al 和 Si 的共掺杂进一步增加了 H₂ 解离吸附的热力学驱动力，Fe-Al-Si 钢中 Cu 的掺杂显著强化了驱动力。尽管 Fe-Mn 钢降低了 H₂ 解离吸附的热力学驱动力，然而 Si 的掺杂显著提高了热力学驱动力，使得 Fe-Mn-Si 钢呈现和 Fe-Al-Si 钢一样的效果，Fe-Mn-Si 钢中 Al 的掺杂进一步强化了热力学驱动力。该计算方法澄清了合金元素影响氢的微观机理，为新型抗氢钢的设计开发提供了理论指导和技术支撑。

Z-36

阐述氢在镁中的双重作用：氢致损伤与塑性增强

纪毓成*¹、双飞²、倪志阳¹、付小倩¹、陈章华¹、董超芳¹

1. 北京科技大学

2. Delft University of Technology

氢倾向在镁及其合金表面发生自发的还原反应被认为是镁合金耐腐蚀性差的重要因素，而还原氢同时会影响镁/镁合金的力学性能，但该现象的原子尺度机制尚不明确。实验发现，充入原子氢的镁其延伸率比在空气中高 2.76%。为揭示其物理本质，本研究采用结合第一性原理计算、分子动力学/静力学(MD/MS)模拟和晶体塑性有限元法(CPFEM)的多尺度建模方法，系统阐述了氢在不同尺度上对镁的影响。第一性原理结果表明，柱面 Prism-I {10-10} 具有最强的腐蚀倾向，其有效氢吸附密度达 18 nm⁻²，且扩散势垒仅为 0.156 eV H⁻¹；而基面 Basal {0001} 则表现出最优的表面抗氢性。当氢渗入镁基体后，多数孪晶面的广义层错能降低了 2.26%~18.49%。MD/MS 模拟进一步显示，对于基面{0001}，氢不仅将其层错能降至 -7.13 J/m²，还会抑制沿[10-10]方向的解理开裂。晶内氢的存在会诱发层错早期形核，并提高裂纹尖端的临界应力。CPFEM 模型表明，孪晶生长的差异集中在 4%应变范围内：氢的添加促进了镁的孪生，但在超过 4%应变后，Mg 与 Mg-H 模型中各滑移面的相对活动性趋于一致。

Z-37

基于机器学习的高性能钎合金电接触材料的开发

何兴群*、周龙海、贾志强、陈昊

西安诺博尔稀贵金属股份有限公司

钎合金电接触材料在强度、弹性、接触电阻稳定性和耐腐蚀性等方面明显优于 Ag 基、Au 基等贵金属

电接触材料，该材料在国防装备、电子信息材料制备、导电环等关键电路连接器中具有重要应用。然而，现有国内外钌合金电接触材料已很难满足对该材料长寿命、高精度、耐蚀、低能耗等要求。因此，开发高性能钌合金电接触材料以满足我国相关行业的发展需求十分紧迫。为了实现高性能钌合金的快速开发，本研究通过总结合金元素对钌基体组织性能的影响规律，分析不同合金成分和制备工艺下合金的强化方式，构建了基于钌合金材料的专家经验知识库。收集钌合金成分-工艺-性能数据，基于大语言模型建立钌合金机器学习设计系统，比较描述符设计、特征量筛选方法等对预测精度影响，并比较单模型与多模型在多目标优化设计中的差异。结果表明，通过引入经验知识能够有效提高搜索效率。通过多次遗传算法筛选等，可有效提高模型的泛化能力。最终实现 Pd-xAg-xPt-xCu-xRe (XNPA-2025) 合金的开发，经测试该合金的导电率 $\geq 20.5\%$ IACS，硬度 ≥ 350 HV，抗拉强度 ≥ 1200 MPa，延伸率 $\geq 8\%$ ，具有优异的综合性能。本研究提出了新的合金设计开发策略，为高性能钌合金电接触材料的开发提供设计参考。

Z-38**Prediction of cemented carbides' hardness at elevated temperatures based on finite element modelling and mesoscale material characterization**

Wu Wen*

ZHUZHOU CEMENTED CARBIDE GROUP CO.,LTD

The mechanical properties of cemented carbides (WC-Co), such as hardness, strength and toughness, are key factors of influence to the performance of such type of cutting tools, especially at elevated temperatures during cutting process. The mechanical properties of cemented carbides are highly dependent on the micro-meso-macro structures of such composite material. The present study aims to develop a finite element modelling (FEM) framework for the prediction of hardness of cemented carbides at elevated temperatures based on meso-scale material characterization. Scanning electronic microscopy (SEM) images of industrial grade of cemented carbides are obtained and used to generate 2D CAD models to preserve the geometric features of the grain-level structures of the materials. FEM work based on the nano-indentation test scenario is implemented using the commercial code Abaqus with the WC/Co material parameters found in literature. The FEM results are interpreted using the Oliver-Pharr method to obtain the predicted hardness at temperatures up to 600°C. High-temperature hardness tests (up to 1000°C) are conducted to validate the feasibility of this FEM method.

Z-39**AI 赋能钛基工程合金服役性能评价**

王皞

中国科学院金属研究所

Z-40**TiN 涂层氧化/腐蚀机理及其环境依赖性的精确计算**

黄良锋*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

氮化钛 (TiN) 拥有优异的结构稳定性、力学强度、耐磨性、抗腐蚀/氧化、生物兼容性等特点，在海洋/高温材料、核电、光电子、生物医疗等领域被广泛用作结构/功能性涂层。TiN 微观表界面结构在相关氧化/腐蚀性环境中的服役行为和多场耦合原理仍缺乏系统理解，极大限制了人们精准研发更多新型涂层的能力，从而无法有效满足极端苛刻环境下的材料保护需求。我们利用第一性原理计算方法，系统研究了 TiN 涂层上几类关键表面和晶界结构上环境物质 (O₂ 和 H₂O 及相关分解基团) 的微观运动行为和物理化学机理，在 TiN 表面钝化/腐蚀趋势方面自洽解释了各类实验报道现象，并成功指导了实验合作者开展验证性的表面本征态测量、强酸/强碱腐蚀测试和微结构表征工作，还进一步促进了第一性原理计算结果有效指导 TiN 涂层在实际海域的服役测试工作。部分研究成果已经发表在 Acta Materialia 289, 120909 (2025)、Acta Materialia 281, 120447 (2024)、Nano Letters 24, 12568 (2024)、Materials Horizons 11, 5972 (2024) 等杂志上。

Z-41

 γ -TiAl 中螺位错芯与碳或铌的相互作用的多尺度研究王昊*¹、汪进凯¹、陆家焱¹、鲁晓刚¹、陈迎²、施兴华³

1. 上海大学材料科学与工程学院

2. 日本东北大学

3. 国家纳米技术中心

γ -TiAl 低温塑性问题一直是其大规模应用的阻碍。本文研究了 TiAl 剪切与拉伸过程中的化学键变化,并结合原子的局域能变化,分析了在剪切与拉伸中,各化学键对材料变形的重要性。研究发现在 TiAl 中存在复杂的 Ti-Al 多中心键,在剪切与拉伸中起到十分重要的作用;另一方面,在拉伸过程中,Al-Al 共价键也起到了不可忽视的作用,为材料改性提供了新理论依据。结合局域能理论,该研究提供了一种新的化学键分析方法。[1-3]

本文利用半离散变分派纳模型研究了合金元素对 γ -TiAl 层错和位错性质的影响。以层错能数据为基础,采用半离散变分派纳模型研究了间隙元素对 TiAl 的派纳力的影响,发现除碳外,其它元素均能降低材料的派纳力,促进位错移动。该研究从理论上证明材料中含有氧元素时,钉扎位错的是细小的氧化物沉淀,而非溶质状态的氧元素。[4-5] 为了更准确,更高效的研究含 Nb 合金的性质,基于包括深度神经网络的机器学习开发了 TiAlNb 三元势。[6-7]

本文成功应用量子力学/分子力学 (QM/MM) 混合方法,克服了纯量子力学计算尺度限制以及分子动力学研究共价键的不利影响。在 γ -TiAl 位错的长程弹性场下,研究了代表性合金元素 C 和 Nb 在<110>方向扩展螺位错核心中的占位情况,发现它们影响扩展位错向全位错的转变。同时,研究了外力作用下扩展位错发生的交滑移现象,以及转变为全位错对位错滑移的影响。[8]

参考文献:

1. J. Wang; H. Wang, et al. Philosophical Magazine, 99, 24, 1, 2019
2. Z. Fu; H. Wang, et al. Materials, 13, 2016, 2020
3. J. Wang; H. Wang, et al. Phys. Chem. Chem. Phys., 2021, 23, 3905
4. J. Wang; H. Wang, et al. Vacuum, 110866, 197, 2022
5. J. Huang; H. Wang, et al. Phys. Scr., 085403, 97, 2022
6. J. Lu, H. Wang, et al. J. Chem. Phys. 158, 204702 (2023)
7. T. Tan, H. Wang, J. Phys.: Condens. Matter 37 (2025) 205002 (12pp)
8. J. Wang, H. Wang, et al. Acta Mater., 266, 119647 (2024)

Z-42

钨中晶界附近氢原子强捕获和通道扩散现象的原子尺度模拟李亚文^{1,2}、李小椿*¹、周海山^{1,2}、罗广南^{1,2}

1. 中国科学院合肥物质科学研究院等离子体物理研究所

2. 中国科学技术大学

钨被视为未来聚变堆装置中最理想的面向等离子体材料。聚变氘氚反应和中子嬗变将在材料中产生大量的氢原子。钨中晶界是杂质氢原子的缺陷汇,易在晶界处聚集形成氢泡,严重降低材料性能。通常情况下,金属中的晶界会增强杂质在材料中的传输速率。部分实验研究也支持这一观点,表明晶界可以为氢原子提供快速扩散路径,但原子尺度上的模拟研究却呈现出不同的结果。另外,关于钨晶界中氢的扩散也存在着类似的争议,报道了增强和抑制两个结果。这些研究表明,氢原子在晶界上的捕获和扩散行为仍需要进一步的探索。

本研究利用分子动力学方法,系统考察了钨中九种晶界对间隙氢团簇和空位氢团簇的捕获和扩散行为。研究发现,不同晶界对氢团簇呈现出间隙捕获和空位捕获机制。定量分析了单个氢原子倾向于占据大体积、小畸变间隙位点,定性解释了晶界局部结构环境对氢团簇偏析的影响。间隙氢团簇表现出不同于块体钨的低临界氢数量触发的瞬时自捕获现象。空位氢团簇结构随尺寸增大呈现从哑铃状构型到平面三角形,再到三维四面体、六面体/四棱锥、八面体的规律性结构演变。间隙氢原子在不同温度下的扩散行为表现出明显的维度转变特征,根据扩散特性将晶界分为位错晶界约束扩散型、普通晶界过剩体积激发扩散型、孪晶类

体扩散型；另外，氢原子在晶界中的扩散呈现出单通道和温度驱动的跨通道迁移的现象，这一特性与温度诱导的多维度扩散转变相协同。其关键特征在于其多通道选择特性，扩散通道以及过渡态位置对应不同的偏析位点。MSD 及 NEB 相关计算表明，氢原子沿晶界以及垂直晶界面的扩散能垒远大于块体，且氢与晶界解离能显著高于最大扩散能垒，这在多种晶界中具有普适性。以上结果从另一个视角表明，晶界可以为氢原子的扩散提供多扩散通道，尽管扩散速率不如体相快。这些行为与晶界结构单元、位错线分布以及本征性质密切相关。以上研究为晶界上氢原子的捕获和扩散行为提供了一些见解，对聚变堆材料的优化设计具有一定的指导意义。

Z-43

金属与合金键强—晶界能—宏观性能构效关系

李昕*

吉林大学材料科学与工程学院

发展高强度的金属材料一直是金属领域里的重要研究内容。将金属的微观原子键合强度与宏观强度相关联，探究微观结构性质与宏观力学性质的关联，理解材料的本质属性并接近材料强度的上限，是领域内长期悬而未决的挑战。我们从紧束缚模型的 d 带特征和断键机制出发，结合晶界能和表面能的近似正比关系，基于内聚能和原子半径推导出键强描述符。该描述符精准描述了不同金属的不同类型晶界的晶界能，还精准量化了多晶金属由晶界主导的、与键强相关的宏观力学性质，如模量和极限强度等。该模型还适用于高熵合金和非晶态大块金属玻璃的模量、断裂强度等宏观性质，对其实验和理论结果表现出良好的预测精度和广泛的适用性。该框架揭示了全新的键强物理图像：原子间的排斥/吸引效应在强键/弱键金属的键强相关性质变化中起核心作用，具有坚实的物理基础，与经典模量理论兼容。这些发现不仅为从原子水平的角度理解键合强度与宏观性能之间的关系提供了坚实的物理指导，而且为加速高性能合金的设计提供了有效的工具。

参考文献

Li, Xin; Wu, Hao; Gao, Wang*; Jiang, Qing. A roadmap from the bond strength to the grain-boundary energies and macro strength of metals. Nat. Commun., 2025, 16, 615

Z-44

铜合金中氢与晶格缺陷相互作用的原子尺度研究

魏明亮、张朋波*、王桂秋

大连海事大学

氢脆（HE）作为结构材料失效的关键机制，在海洋工程、核能装备及航空航天等重大工程领域持续引发关注。现有理论普遍认为，HE 源自氢（H）原子在材料晶格缺陷处的选择性富集，进而引发局部力学性能劣化。特别是在海洋服役环境中，船用铜（Cu）合金材料（如螺旋桨、海水管路及冷凝器）因长期暴露于富氢环境而面临严重氢脆风险。但目前对 Cu 合金中 H 原子与结构缺陷的微观相互作用机理的认识仍不充分。本研究基于第一性原理计算，系统研究 H 原子在 Cu 基体及其与典型晶格缺陷（表面、空位、晶界、溶质原子）的相互作用，探明合金元素对 H 稳定化效应的作用机制。对于纯 Cu 体系，H 原子优先吸附在 Cu 合金表面 hollow 位，吸附能为 -0.25 eV。动力学结果表明 H 从表面向亚表层迁移需克服 0.73 eV 的能垒，进入体相后扩散能垒统一降至 0.34 eV，表明表面缺陷对 H 的初始俘获具有决定性作用。Cu 体相中，H 优先占据八面体间隙位，固溶能为 0.37 eV。H 倾向沿着八面体-四面体-八面体的迁移路径稳定迁移，势垒为 0.34 eV。对于空位捕获 H 的影响，空位缺陷显著降低 H 的固溶能至 0.11 eV。单双空位可分别捕获 6 和 10 个 H 原子。且空位-H 团簇的稳定性随尺寸的增加而变大。针对典型晶界的对比研究表明： $\Sigma 5(210)[001]$ 和 $\Sigma 9(221)[110]$ 晶界使 H 的固溶能分别降低至 0.20 和 0.23 eV，而 $\Sigma 3(111)[110]$ 晶界则提升至 0.41 eV。动力学上， $\Sigma 5$ 和 $\Sigma 9$ 晶界降低了 H 的迁移能垒，偏析能计算结果证实 H 倾向于向这两类晶界偏聚。而 H 更倾向滞留于体相而非 $\Sigma 3$ 晶界。综上，Cu 合金体系中 H 原子对晶格缺陷的亲合力遵循：表面 > 空位缺陷 > $\Sigma 5$ 晶界 > $\Sigma 9$ 晶界 > 体相 > $\Sigma 3$ 晶界的顺序。Ni 和 Fe 元素的引入能有效增强 H 在合金表面的吸附倾向，并提高体系的 H 平衡浓度及扩散系数促进 H 的渗透。此外，Ni 和 Fe 原子可分别稳定捕获 6 个 H 原子，并将 H 在体相的迁移势垒分别降至 0.26 和 0.27 eV，在晶界中的迁移势垒进一步降低至 0.07 和 0.03 eV，促进弥散的 Ni-H 和 Fe-H 复合物的形成。此外，Ni 和 Fe 原子增强了空位对 H 的捕获能力，Ni-空位和 Fe-空

位复合物可分别捕获多达 10 个 H 原子。因此 Ni 和 Fe 有效抑制了 H 与晶格 Cu 原子的直接作用以及 H 在晶格缺陷处的聚集，从而显著缓解 HE，而 Al 元素表现出相反的调控效应。

参考文献

[1] Mingliang Wei, Pengbo Zhang*, et al. Atomic simulations of the behavior of hydrogen in copper-nickel-aluminum alloys, *Int. J. Hydrogen Energy*, 91 (2024) 354–362.

[2] Mingliang Wei, Pengbo Zhang*, et al. First-principles investigation of the trapping mechanism of hydrogen in copper alloys from surface to vacancy, *Int. J. Hydrogen Energy*. 138 (2025) 206–214.

致谢：国家自然科学基金（12175028）和辽宁省自然科学基金（2023-MS-128）

Z-45

Amorphization transformation and interface fracture of crystalline amorphous dual-phase FeNiCrCoMn high-entropy alloy multilayers

Han Song, Gao Tinghong*

Guizhou University

The deformation behavior and mechanical properties of crystalline/amorphous dual-phase FeNiCrCoMn HEA multilayers were investigated during the tensile process using molecular dynamics simulation. The influences of layer number and strain rates on the tensile strength, phase transition, dislocation density and stress-strain relationship were investigated. The results show that the strength of the amorphous/crystalline dual-phase HEA composites increases with increasing number of layers. Due to the complex stress field in the amorphous layers, the coupling between crystalline and amorphous plasticity in the amorphous/crystalline HEA composites leads to a more uniform redistribution of plastic deformation, which results in interfacial hardening. As the number of layers increases to a certain value, this effect disappears, resulting in the mechanical performance degradation. In the crystalline layer, a phase transition from FCC to HCP occurred. Low strain deformation promotes atomic rearrangement to produce new crystal structures. High strain deformation weakens interface effects, accelerate atomic amorphization, and reduce strength.

Z-46

铝中晶界运动特性影响的分子动力学研究

宗浩鹏¹、廖卓晶¹、张亮^{*1,2}、黄晓旭^{1,2}

1. 重庆大学材料科学与工程学院

2. 重庆大学高端装备机械传动全国重点实验室

晶界迁移作为微观组织演变的核心过程，其原子机制与动力学规律是材料设计的理论基础，深入研究晶界迁移机制对调控材料的性能具有重要意义。本文使用分子动力学（MD）模拟研究不同温度以及不同驱动力方法下铝晶界的迁移行为，并分析铝及铝合金晶界迁移机制。研究表明在使用合成驱动力法时，较高温条件下（500 K-700 K）各晶界皆满足热激活运动，而在（300 K-400 K）温度区间， $\Sigma 5(310)$ 、 $\Sigma 29(520)$ 晶界以反热激活方式进行迁移。同时以上晶界呈现出剪切耦合迁移的特征，随后因温度的升高从而导致耦合强度持续降低。在使用应力驱动法时， $\Sigma 37(610)$ 、 $\Sigma 13(510)$ 两晶界在室温下发生 $\langle 100 \rangle$ 至 $\langle 110 \rangle$ 两种耦合模式的转变，在较高温条件下（500 K-700 K）， $\Sigma 37(610)$ 、 $\Sigma 13(510)$ 、 $\Sigma 5(310)$ 晶界迁移速度不随温度升高而发生改变，而 $\Sigma 29(520)$ 晶界在 700 K 时表现出更多的滑移现象从而使得晶界迁移速度减小。200 组任意取向晶界呈现出晶界迁移速度与晶界能和晶界自由体积的减小而加快的负相关性。

Z-47

多组元非晶合金神经演化机器学习势的开发与验证

彭平*、赵瑞

湖南大学 材料科学与工程学院

Pd-Cu-Ni-P alloy is an ideal model system of metallic glass known for its exceptional glass-forming ability. However, few correlation of structures with properties was systematically investigated owing to a lack of interatomic potential. In this work, a neuroevolution machine learning potential (NEP) with efficiency close to embedded atom method (EAM) potentials is developed. Its accuracy has been compared to density functional

theory (DFT) calculations. For energy, force and virial, the training errors are 6.0 meV/atom, 111.1 meV/Å and 21.5 meV/atom, respectively. By means of this NEP, several thermodynamic parameters such as glass transition temperatures and pair distribution functions of Pd₄₀Cu₃₀Ni₁₀P₂₀ and Pd₄₀Ni₄₀P₂₀ liquid and glassy alloys as well as their short-range orders, tensile and compression strengths, transport properties etc. have been evaluated by a series of molecular dynamic simulations. A good agreement with DFT calculations and previous experiments indicates this NEP provides an accurate and efficient scheme in the analysis and exploration of microstructures, thermodynamic and kinetic properties of Pd-Cu-Ni-P alloys.

Z-48

纳米多晶 NiCoCrFe 高熵合金多重变形机制的定量分析

侯兆阳

长安大学

高熵合金 (HEA) 因其独特的结构特征和优异的力学性能而受到广泛关注。NiCoCrFe 基高熵合金在变形过程往往呈现多重变形机制, 但不同变形机制对总变形贡献的定量分析仍需要进一步深入研究。本研究采用分子动力学方法, 对不同晶粒尺寸下纳米晶 NiCoCrFe 高熵合金的拉伸变形过程进行了模拟计算, 结果表明随着晶粒尺寸的减小, 体系平均流变应力从 Hall-Petch (HP) 强化关系逐渐转变为 Inverse Hall-Petch (IHP) 软化关系。进一步研究发现, 在纳米晶 NiCoCrFe 高熵合金的 HP 强化和 IHP 软化机制中, 均存在多重变形机制。HP 强化机制中存在 Shockley 部分位错滑移外, 还存在大量的内禀堆垛层错和 HCP 马氏体相变; IHP 软化机制中除了晶界迁移, 还存在大量的内禀堆垛层错和少量的 HCP 马氏体相变。基于连续介质运动学理论, 定量给出了各单个变形机制对总应变协调中所起到的作用, 该结果比根据各微观结构的数量占比更准确揭示多重变形机制。

Z-49

掺杂大晶粒 UO₂ 裂变气体释放行为的模拟研究

孙丹*¹、辛勇¹、赵纪军²

1. 中国核动力研究设计院

2. 华南师范大学

UO₂ 燃料在服役时表现出复杂的堆内行为, 辐照裂变产生裂变气体产物, 随着燃耗的增加, 气泡数量增加、不断迁移和长大, 燃料中出现裂变气体释放等辐照效应, 导致燃料性能下降, 限制了燃料的寿命, 影响反应堆安全性。UO₂ 陶瓷燃料芯块的性能改进是领域内研究的热点, 改进型 UO₂ 应具有经受更高燃耗和长循环周期的能力。掺杂大晶粒 UO₂ 芯块是当前 UO₂ 改进的重要研究方向, 可以提高 UO₂ 的裂变气体包容能力, 但掺杂大晶粒 UO₂ 降低裂变气体释放性能有一定差异, 为了设计优异性能的掺杂大晶粒 UO₂, 澄清掺杂对 UO₂ 中裂变气体释放行为的影响机制是亟待解决的关键科学问题。以掺杂大晶粒 UO₂ 为研究对象, 首先通过第一性原理研究了掺杂元素影响气体行为的微观机理, 接着, 建立了相场模型揭示掺杂大晶粒 UO₂ 辐照性能差异的物理机制。研究表明掺杂大晶粒 UO₂ 的晶粒尺寸增大, 增加了裂变气体从晶内扩散到晶界的距离, 提高了裂变气体包容能力; 然而, 掺杂原子会降低 Xe 原子的扩散势垒, 促进裂变气体的扩散, 加速裂变气体释放过程。因此, 掺杂大晶粒 UO₂ 裂变气体释放行为差异是由晶粒尺寸和裂变气体扩散速率的协同作用导致的。

Z-50

二维双切换铁电交错磁体: 电控自旋与磁振子手性劈裂

王磊

内蒙古大学

在自旋电子学与磁子学蓬勃发展的当下, 对兼具新颖磁序和多功能调控潜力的材料探索已成为核心前沿。本报告提出并预测了一类全新的二维材料——双切换铁电交替磁体 (FEAMs)。我们发现, 在这类材料中, 可翻转的铁电极化 (P) 能够作为一个独特的开关, 首次实现对电子自旋劈裂 (S) 和磁振子手性劈裂 (M) 的精准同步调控。这为在单一原子层材料内部, 统一地电学操控基态电子自旋态与集体磁振子激发提供了一条前所未有的途径。我们通过深入的对称性分析, 并结合对通过数据库筛选出的典型候选材料 (如 CrPS₃ 和 V₂I₂O₂BrCl) 进行的第一性原理计算, 系统阐明了其核心机制: 由特定原子位移驱动的铁电

性巧妙地打破了晶体反演对称性，但同时又关键性地保留了例如 $[C_2 \parallel M]$ 等特定晶体对称性。正是这种独特的对称性协同效应，使得电极化（ P ）能够与交替磁体中本征的电子结构（表现为自旋劈裂 S ）以及控制磁振子手性的各向异性交换相互作用（ M ）实现紧密耦合。计算结果清晰且有力地表明，反转极化方向（ $P \rightarrow -P$ ）将同步导致电子自旋分裂符号的反转（ $S \rightarrow -S$ ），并使磁振子模式的手性亦随之反转（ $M \rightarrow -M$ ）。这种标志性的“双切换”效应，预计可通过磁光克尔效应符号反转等实验手段进行直接且灵敏的检测。此项工作不仅为在二维体系中实现对耦合电子与磁子特性的电学操控开辟了一条材料特异性的新路径，更为未来新型多功能自旋电子学与磁子学器件的开发奠定了坚实的基础。值得强调的是，我们还进一步预测了实验合成的三维纳长石材料亦是一种典型的交替磁体，并详细计算了其非相对论自旋劈裂能带、手性自旋波及其手性磁光克尔效应。我们深入分析了手性自旋波色散的形成源于交替磁体对称性导致的海森堡模型中各向异性的交换常数，并揭示了交替磁体中非磁性原子形成的局域手性如何在晶体中诱导晶体手性磁光克尔效应。这一拓展性研究不仅验证了本理论框架的普适性，也为探索更多新型手性磁性材料指明了方向。

Z-51

3D 打印连续碳纤维增强复合材料截面形貌影响因素研究

唐信安

宁夏大学

3D 打印技术在连续碳纤维增强复合材料制造中具有可设计性强、可制备复杂结构等优势，但其成型质量与传统制造方式相比存在较大差距。单道截面形貌作为结构件的最小成型单元对孔隙的形成及宏观力学性能具有重要影响。本文采用计算流体动力学（CFD）方法，构建了 3D 打印碳纤维增强复合材料的熔融挤出及堆积模型，研究了喷嘴高度、纤维体积分数、喷嘴直径等对熔体流动行为及截面形貌的影响规律，并开展了相应的实验对模型准确性进行验证。研究结果为优化打印工艺参数和抑制成型缺陷提供了理论支撑和技术指导。

Z-52

α -Fe 表面氢滞留与脱附行为的能量依赖研究

吴伟、李小椿*、周海山、罗广南

中国科学院合肥物质科学研究院等离子体物理研究所

RAFM 钢因其优异的抗中子辐照性能，良好的机械性能和成熟的制备工艺，被认为是理想的聚变堆第一壁结构材料。当 RAFM 钢受到氘氚等离子体轰击，会导致大量的氢同位素滞留，并发生氢脆和氢渗透等一系列不利现象。材料表面为滞留氢提供大量吸附位点，而表面氢脱附行为是降低氢滞留和渗透的重要途径。为深入理解该过程中的表面效应，本研究以 α -Fe 为研究对象，构建（100）、（110）、（112）三种晶面，系统探讨动态辐照条件下的表面氢滞留与脱附行为的微观机制。

本研究采用分子动力学方法，在 300K 下，分析了不同注入方式（连续注入和非连续注入）和不同注入能量（10eV-100eV）对表面氢脱附行为的影响。结果表明，在低能量连续氢粒子注入条件下，氢原子向表面扩散并在表面形成吸附层，同时部分吸附层氢原子发生脱附行为。随着吸附层氢原子数量的增加，氢脱附速率随之增大，并且逐渐趋于定值。氢原子的注入深度随氢注入能量的增加而增大，向表面扩散的速率减小，达到稳态脱附时，氢脱附速率随注入能量的增加而降低。

根据连续注入的结果，我们进一步分析非连续氢注入条件下的影响因素，发现反射原子和吸附层原子间的协同作用是导致不同能量下氢脱附差异的主要原因。反射氢原子通过碰撞将动能传递给表面吸附的氢原子，从而促进其脱附；反射原子数量越多，能量传递效率越高，脱附概率随之增加。此外，吸附层中氢原子密度越大，微小扰动即可诱导相邻氢原子结合并以分子形式脱附。随着注入能量增加，反射氢原子数量减少，动能传递效应减弱，稳态脱附的维持需依赖更高密度的吸附层原子。

Z-53

高温烧蚀诱导实现碳纳米管阵列层间超润滑

范云龙、赵予顺*

哈尔滨工业大学

高强度超拉伸碳纳米管材料的研发仍是高科技产业的核心课题。高温烧蚀技术为制备高度融合的碳纳米管材料提供了新路径，该技术促使单个碳纳米管融合形成高度互联结构。为探究其内在机理，本研究采

用大规模原子分子并行模拟器 (LAMMPS) 进行分子动力学模拟, 通过 CEDIP 和 AIREBO 势函数模拟碳原子在高温烧蚀过程中与压缩过程中的动态行为。结果表明: 高度互联的碳纳米管阵列可通过管间共价键融合, 转变为致密的类石墨烯结构。此外, 横向压缩、拉伸及循环加载模拟显示, 烧蚀过程中碳纳米管阵列的力学性能与其结构形态密切相关。值得注意的是, 管间与层间的滑移及失效行为对材料最终力学性能具有显著影响。本研究中高温烧蚀过程中的碳纳米管阵列的最大拉伸率高达 700%。该研究不仅阐明了高温烧蚀后碳纳米管阵列的本征结构演化机制, 更为设计新一代碳纳米管超材料提供了重要理论依据。

Z-54

Dual-Objective Optimization Screening of Intermetallic Compound Interconnects

Xiaofeng Zhang, Jiaqiang Yang*, Xiaofei Zhang, Ningyu Zhang, Yubing You

Zhengzhou university

With the ongoing miniaturization of semiconductor chips, extensive research is being conducted on advanced interconnect materials that have the potential to surpass the performance of traditional copper. Here, we report an interpretable machine learning strategy accelerating the discovery of intermetallic candidates. Relevant data were systematically curated from published literature and partitioned into two subsets for the construction of two predictive models. Kernel Ridge Regression achieved $R^2=0.896$ for cohesive energy prediction, while Farthest Point Sampling (FPS)-optimized SVR minimized $\rho \times \lambda$ prediction error. SHAP analysis identifies Boiling point (80%) and cohesive energy (45%) as dominant factors. Subsequent dual-objective optimization via Pareto frontier analysis integrated both predictions, identifying CoOs, RhOs, Ir4w, Ru2Os, Ru3Os and Cu2W high-potential candidates. This work establishes an integrated computational strategy for rapid screening of novel intermetallic interconnect materials. The methodology provides a promising paradigm that can be extended to other areas of material design, contributing to accelerated discovery and development in advanced electronic materials.

Z-55

超音速微粒轰击和石墨烯协同作用对 TiAl 合金力学性能影响的原子模拟

丁行友*

兰州理工大学机电工程学院

多因素协同作用可以产生比单因素更显著的效果, 被认为是提高材料力学性能的有效方法。采用分子动力学和正交试验方法, 建立了不同速度和石墨烯层位置的超音速微粒轰击模型, 研究了协同效应对 TiAl 合金力学性能的影响。基于位错和弹塑性理论, 分析了轰击速度与石墨烯层位置之间的协同作用对 TiAl 合金微观组织、残余应力和力学性能的影响, 并与单因素作用进行比较。结果表明, 轰击速度和石墨烯层位置之间存在显著的协同作用, 轰击促进了位错的形成和移动, 同时增强了 TiAl 合金与石墨烯之间的结合。石墨烯层抑制了由轰击引起的位错运动并分散应力。当轰击速度为 1500 m/s 且石墨烯层位于 TiAl 合金表面时, TiAl 合金表现出优异的抗拉强度, 弹性模量、最大压痕载荷和硬度显著提高, 整体力学性能得到增强。这种协同作用源于三种机制: 热失配强化、负载转移强化和位错强化。该研究可以加深我们对协同效应的认识, 为设计性能优越的高端专用装备合金提供理论依据。

Z-56

从电子结构视角理解 e/a 对 NiMnGa 相变温度的调控作用

赵莹 1,a*

1. 材料各向异性与织构教育部重点实验室, 材料科学与工程学院, 东北大学, 沈阳市 110819

a zy951030@yeah.net

形状记忆合金的磁热效应、弹热效应等多种功能行为, 均源于奥氏体与马氏体之间的可逆马氏体相变, 其中相变温度 T_M 决定其工作温度窗口。尽管已有研究表明可通过价电子浓度 (e/a) 调控 T_M , 其内在物理机制仍不明确。为此, 本研究基于第一性原理计算, 系统研究了 NiMnGa 合金中 e/a 对相稳定性的影响。结果表明, 随着 e/a 升高, 奥氏体的热力学与动力学稳定性均降低, 解释了 e/a 增大导致 T_M 降低的现象。稳定性下降主要归因于费米能级附近态密度的升高以及 Ni-Ni 间 d-d 反键轨道的逐步填充, 从而削弱了成键强度。本研究从电子结构角度揭示了 e/a 对 T_M 调控机制, 为设计具有特定目标工作温区的形状记忆合金提供了理论依据。

关键词：形状记忆合金；相变温度；价电子浓度；电子结构；反键

Z-57

GH4169 高温合金 γ 相中氢扩散和渗透机制的第一原理研究

张明白、张川晖*

国家材料服役安全科学中心，北京科技大学

理解 γ 相内的氢行为对于提高 GH4169 高温合金的抗氢脆和抗氢腐蚀性能至关重要。本工作通过第一性原理方法，对比分析氢原子在八面体位点 (O_1 、 O_2) 和四面体位点 (T) 典型氢陷阱结构中的吸附稳定性，系统计算了 γ 相中氢的溶解率、扩散系数及渗透率，阐述氢在不同陷阱间以及空位陷阱间的扩散路径和渗透机制。结果表明：富含 Nb 的陷阱结构具有较高的热力学稳定性，适合氢的吸附。同时，含空位的陷阱结构表现出更强的氢捕获能力，对比多种陷阱结构发现捕获氢原子的能力从高到低排列为：空位陷阱 > 富 Nb 陷阱 > 富 Ni 陷阱。对扩散能垒的计算显示，氢原子在 $O_2 \rightarrow T$ 路径中扩散和渗透最容易，而氢最难沿 $O_1 \rightarrow T$ 路径扩散。空位缺陷显著增强了氢在陷阱间的渗透率，而且 Ni 空位陷阱中的氢的扩散系数最高，且氢渗透率对温度依赖性很弱； $O_2 \rightarrow T$ 路径中氢原子的渗透率与温度呈负相关。本研究从原子尺度揭示了 γ 相中氢的迁移规律及其与微观缺陷的相互作用机制，为优化 GH4169 合金的抗氢脆性能提供了理论依据和设计指导。

Z-58

氧化钇/氧化铝复合阻氢涂层中氢渗透的微观机理研究

叶炜豪、张川晖*

国家材料服役安全科学中心，北京科技大学

由于能够显著降低氢的渗透率， Y_2O_3/Al_2O_3 复合涂层作为阻氢材料被广泛应用于多种合金表面。在氢环境下服役时，氢分子在复合涂层表面发生解离，氢原子沿特殊路径从涂层表面向内部扩散并穿透至金属基体，最终对合金材料产生不利影响。本工作基于第一性原理方法，计算研究了氢在 Y_2O_3 和 Al_2O_3 涂层中的扩散与渗透过程，并探索空位缺陷对涂层阻氢性能的影响机制。首先，探索了氢在 Y_2O_3 表面的吸附与解离，及其内部扩散的规律。结果表明， Y_2O_3 的氧层终止表面较为稳定，未饱和的氧原子有助于氢原子在其上方的吸附。表面空位作为中间位点降低了氢原子穿越表面所需的势垒，从而促进了氢原子向体相的扩散，且氢原子是通过八面体和四面体间隙位点形成的螺旋通道进行扩散。在 800-900 K，计算得到氢在 Y_2O_3 涂层内部的渗透率与实验数据吻合的很好。其次，探讨了缺陷尖晶石构型 $\gamma-Al_2O_3$ 中氢的聚集与扩散行为。结果表明，八面体陷阱能够容纳两个至三个氢原子，这些氢原子可能与氧原子键合形成羟基，或成对聚集形成氢分子。氢原子和氢分子在 $\gamma-Al_2O_3$ 中的渗透率相近，在 900 K 时，渗透率结果与实验数据高度吻合。电子结构分析表明，氢分子与周围原子间没有显著相互作用，这是其在 $\gamma-Al_2O_3$ 中扩散较为容易的主要原因。这些结果说明氢分子在 $\gamma-Al_2O_3$ 中的氢渗透起关键作用，该结论对普遍认为氧化物中氢渗透主要归因于氢原子的观点产生了冲击。以上详细描述了氢在 Y_2O_3 和 Al_2O_3 中的吸附及扩散规律，并系统地探讨了氧化物涂层的阻氢机理，为提升 Y_2O_3/Al_2O_3 复合涂层的阻氢性能提供了理论依据。

Z-59

材料合成可能性预测方法与应用

王彦超

吉林大学

Z-60

二维材料粒子辐照模拟平台 I2DM

周苗

北京航空航天大学

随着核技术、空间技术的发展，作为国家重大战略需求，更多的材料和器件需要在各种极端辐照环境下应用。在过去几年里，我们开发了首套针对二维材料的离子辐照效应模拟平台 I2DM (Ion Irradiation on 2D Matter)。该平台基于二元碰撞模型，结合第一性原理、分子动力学与蒙特卡洛方法，计算辐照过程中粒子与靶材料的相互作用，预测材料的缺陷演化、结构损伤与相关物性。与已有的材料辐照软件不同，I2DM 包含了精确的原子结构信息，考虑了同时碰撞，具有高保真度、高计算效率和广泛的适用性，可扩展到不

同维度的材料系统。我们将讨论 I2DM 在材料改性（半导体掺杂、催化剂、分子筛、单光子发射、拓扑量子态等）及抗辐照材料设计等方面的广泛应用。

Z-61

数据与 AI 驱动的材料软件研究与实践

王宗国*、陈子逸、袁扬、万萌、李凯、王彦桐

中国科学院计算机网络信息中心

随着大数据与人工智能技术（AI）的快速发展，材料科学正逐步加速迈入数据密集与智能驱动的新阶段。AI 技术在材料结构设计、性能预测与优化等方面展现出显著优势，正在深刻变革传统的材料研究范式。本报告系统回顾了近年来 AI 在材料科学中的研究进展，重点介绍了其在晶体结构预测、材料性能评估与高通量筛选等典型方向的应用成果。针对材料领域普遍存在的数据碎片化、模型泛化能力不足等关键问题，研究团队围绕“数据-算法-模型-软件/应用”全链条开展了深入探索与实践布局。具体工作包括，构建统一的材料数据汇交与共享平台，研发具有自主知识产权的材料结构表示方法与深度学习模型，开发多款面向实际科研需求的材料计算软件，发布材料领域的大模型与知识库系统，并在新能源材料、结构材料等方向实现了示范性应用。相关成果为加速材料研发过程、提升材料设计效率提供了有力支撑，展示了数据与 AI 深度融合在材料科学中的广阔前景。

Z-62

Orbital-Free Methods & Software Development for Large-Scale First-Principles Simulations

Wenhui Mi

Jilin university

Kohn–Sham Density Functional Theory (KSDFT) is extensively used in chemistry, physics, and materials science due to its favorable balance between accuracy and computational cost for systems with up to a few hundred atoms. However, using KSDFT for larger system simulations is challenging due to its cubic scaling of computational cost. Orbital-free Density Functional Theory (OFDFT) provides an alternative approach by avoiding the explicit use of orbitals, which simplifies the method and allows for near-linear scaling with system size. This approach makes it feasible to simulate much larger systems and over longer time scales compared to conventional KSDFT. Despite these advantages, the absence of orbitals in OFDFT introduces difficulties in constructing accurate kinetic energy density functionals (KEDFs) and pseudopotentials, which has been a major barrier to its widespread application. To overcome these issues, we have developed a range of advanced nonlocal KEDFs, pseudopotential methods, and related software packages. These innovations have significantly broadened the applicability of OFDFT, enabling successful simulations of more complex systems beyond simple metals, such as semiconductors and quantum dots.

Z-63

CBD-GM 材料智能设计预测云平台

何朝政

西安工业大学

CBD-GM 材料智能设计预测云平台深度融合云端建模、千万级材料数据库、高性能多目标优化计算及 AI 算法，内置自主第一性原理计算程序包，显著降低计算与机器学习应用门槛。提出基于代理模型的多目标优化智能算法，在单双原子掺杂电催化剂设计方面比传统方法效率提升 7 倍，能量预测误差控制在 0.2-0.4eV[1]；基于自然参数网络的原子化能预测方法对于 QM7 数据集的原子化能预测比传统方法效率和精度分别提高了 42 和 11 倍[2]；基于深度学习与晶体扩散模型结合建立的深度预测模型，实现了对材料结构和性质的高效预测，能量预测结果与第一性原理计算流行软件 VASP 对比误差在 0.7-3%，预测时间缩短 100 倍[3, 4]。在此基础上开发出 CBD-GM 云平台，实现“建模-多目标优化计算-AI 算法预测-数据后处理”全流程自动化，操作效率提升 33.3%，并自动提取计算数据入库，实现任务-数据智能管理。该平台为用户提供浏览器云计算服务，赋能企业私有云部署，以智能化范式突破国外垄断。

Z-64

LibRI: 高精度电子结构方法的高性能计算程序库林霈泽¹、何力新^{1,3}、任新国^{*2}

1. 合肥综合性国家科学中心人工智能研究院
2. 中国科学院物理研究所
3. 中国科学技术大学

基于密度泛函理论的第一性原理计算是模拟预测材料微观结构与性质的关键工具，但传统的局域或半局域泛函在某些物理性质的计算中存在定量甚至定性的误差。杂化泛函、RPA、GW 等高精度电子结构方法能正确计算多种性质，但其高昂计算量制约了在实际材料体系计算中的广泛应用。

本报告将介绍研究组自主开发的程序库 LibRI，在实空间框架下实现了高精度方法的高效计算。基于原子轨道基组，通过引入 LRI（局域单位元分解）技术，生成高针对性辅助基组，充分利用原子轨道基组与辅助基组的实空间局域性，构造“整体稀疏、局部稠密”的张量数据结构，将核心环节的计算复杂度由原本的 $O(N^4)$ 降至 $O(N)$ 或 $O(N^2)$ 。在此基础上，发展了一系列优化算法，设计了多层次并行加速方案，降低了程序计算时间与内存消耗量。

LibRI 现已接入国产第一性原理计算软件 ABACUS，可实现单节点完成千原子杂化泛函或 RPA 计算，为材料计算领域的科研提供了有效的计算方法与工具。

Z-65

基于波函数含时演化的大尺度第一性原理计算方法

袁声军

武汉大学

凝聚态物理中多原子体系的第一性原理计算，通常依赖于定态薛定谔方程的求解，需要通过矩阵对角化运算获得电子的能量本征值和本征态。然而，这类计算的复杂度与体系规模呈三次方关系，难以应用于周期性破缺或周期性很大的复杂多原子体系。本报告重点探讨如何将各类求解问题从定态薛定谔方程转化为含时薛定谔方程，以绕过对角化运算，从而实现多原子体系的大尺度第一性原理计算。新方法的计算复杂度与体系规模呈线性关系，将模拟体系的原子数提升数个数量级，不仅适用于基于二次量子化的紧束缚模型（TBPM 方法和 TBPLaS 软件），还可应用于基于单电子近似的密度泛函理论（DFPM 方法和 ABPLaS 软件）。

Z-66

机器学习方法预测新材料

陈元平

江苏大学

机器学习方法在物理学和材料学各个领域都开始广泛应用。机器学习方法的核心基础之一是材料数据库，长期以来有效地产生能量稳定的晶体结构一直是材料设计中的一个挑战，主要是由于晶格中原子的巨大排列组合。为了促进稳定材料的发现，我们提出了一种生成可合成材料的框架，利用点云表示来编码复杂的结构信息。该框架的核心是引入扩散模型作为其基础支柱。为了评估我们的方法的有效性，我们使用它从我们的训练数据集中重建输入结构，严格验证了它的高重建性能。此外，我们通过产生大量全新的材料，强调其可合成性，展示了基于点云的晶体扩散方法的巨大潜力。

Z-67

面向计算材料学的物性计算与可视化方法集成王伟^{*1,2}、刘雅超¹、许楠⁴、唐刚³、耿文通²

1. 西安理工大学
2. 浙江师范大学
3. 北京理工大学
4. 浙江大学衢州研究院

高通量材料计算作为一种快速筛选和评估大量候选材料的方法，加速了新材料的发现和优化，提供了深入理解材料特性和预测材料性能的能力，为人工智能研究提供了重要数据集，推动了材料科学的进步。

虽然存在多种工作流软件和商业软件，但缺乏易用性、跨平台性、用户界面友好和低学习成本的软件。在这一背景下，我们自主开发了两款科研软件：VASPKIT 和 ATOMKIT。VASPKIT 专注于处理和分析第一性原理计算方法得出的电子结构和材料性质，具备自动化、快速处理大数据集等优势，并提供用户友好的界面，有助于研究人员轻松进行计算结果的处理和分析。ATOMKIT 集成了晶体结构建模、编辑、结构转换和可视化等功能，支持跨平台运行，操作简单友好，即开即用。本报告将详细介绍这两款软件的功能和应用案例，展示它们在材料研究中的关键作用和潜力。

Z-68

多组元材料的理论研究

杨小宝*、何长春、赵宇军

华南理工大学

增加组成元素种类（比如金属合金、固溶体半导体等）是新材料设计和开发的重要手段。针对光电材料、催化剂、储能材料体系，我们开发了基于结构识别的高通量第一原理计算程序 Structures of Alloys Generation And Recognition (SAGAR)，发布了网页版本，并搭建了自动化计算和数据库分析的计算平台，简化了合金固溶体的计算流程；提出原子分类模型 (Atom Classification Model, ACM) 来描述多组元材料的结构稳定性，实现高效筛选候选结构；并在固溶体半导体光电材料、合金储氢材料、电催化碳氮材料等方面和本单位实验课题组展开了密切合作，取得了很好的结果；针对离域电子主导的体系，我们提出了键熵模型，可以进一步简化相关体系的稳定性评估，提高材料筛选效率，通过局域相互作用实现了长程相互作用的关联。

主要参考文献：

1. J. Chem. Phys. 162, 154104 (2025)
2. Computational Materials Science 248,113564 (2025)
3. Phys. Rev. Mater. 6, L050801(2022)
4. Computational Materials Science 193,110386 (2021)
5. J. Phys. Chem. A, 124, 22, 4506–4511(2020)

Z-69

商图在硅 111 表面 7x7 重构半导体相搜索中的应用

何朝宇

湘潭大学

Si(111)-7×7 重构是自然界中最引人入胜的构型之一，其扫描隧道显微镜 (STM) 图像通过著名的二聚体-吸附原子-堆垛层错 (DAS) 模型得到了深入理解。然而，尽管第一性原理计算一致预测 DAS 模型具有金属性，一些实验却观测到了绝缘特征。利用传统方法预测 DAS 类重构结构，仍是解释这一难题的挑战所在。在本文中，我们提出了一种基于图论的创新方法，通过图空间结构搜索程序 RG2 成功预测了 Si(111)-7×7 表面重构。除众所周知的 DAS 模型外，我们还发现了其他低能重构结构，包括具有或不具有堆垛层错的构型，并且其中一些是具有显著带隙的绝缘态，这与 DAS 模型的金属性形成鲜明对比。此外，我们揭示了明确的相变路径以及这些半导体相与金属基态之间可能发生的转变。我们的研究不仅为长期以来 Si(111)-7×7 表面绝缘行为的解释提供了关键新见解，也展示了图论方法在预测复杂表面重构中的强大能力。我们相信，该成果将为表面科学和材料物理领域做出重要贡献。

Z-70

Hefei-NAMD 在激发态动力学研究中的应用

郑奇靖

中国科学技术大学

激发态动力学作为凝聚态物理中的核心科学问题之一，对于理解和优化光电器件、清洁能源转换与自旋电子器件等关键材料体系中的性能具有重要意义。然而，由于其本质上涉及非平衡过程和多粒子相互作用，相关研究长期面临建模复杂、计算成本高、理论不完备等挑战。为此，我们自主研发了具有完全自主知识产权的第一性原理激发态动力学模拟程序包——Hefei-NAMD，并构建了一个能够从时间、空间、动量、能量、自旋等多个维度研究凝聚态体系激发态行为的系统性理论与计算框架。在本报告中，我将系统

介绍 Hefei-NAMD 的理论基础与实现方法, 以及 Hefei-NAMD 在不同功能材料中的研究进展与应用实例。这些研究成果不仅展示了 Hefei-NAMD 的多维度模拟能力, 也为相关实验研究提供了直接的对比与解释平台。

Z-71

材料相界面计算新方法及其应用

张燮

西北工业大学

材料之所以能够实现优异的性能表现, 不仅是因为其本身性质特殊, 往往与材料中存在的界面息息相关。材料在固定成分下, 可能呈现出不同的物相。在相界面上, 材料可能会出现一些特殊缺陷结构, 从而展现出新奇的物理现象与异于基体的独特性质。然而, 对于具有复杂晶体结构的材料, 要通过理论计算直接确定材料相界面结构非常困难, 原因是材料中不同物相的界面组成方式理论上有无无数种, 要找到合理稳定的界面结构如大海捞针。因此, 在本研究中我们从相变的角度去思考如何构建和搜索稳定的共格界面结构。从两种物相的晶格出发, 考虑不同的晶格变换矩阵, 把界面搜索问题转变成另外两个数学问题: (1) 寻找两个变换矩阵, 使得两种物相的超晶胞具有相同的原子数和类似的超胞形状、晶格常数、原子坐标; (2) 寻找两种超胞以何种方式拼接在一起, 能够实现最小的晶格失配。这两个数学问题可以进一步利用匈牙利算法进行原子晶体学对应关系的映射, 并结合高效人工智能遗传算法进行晶格变换矩阵的搜索, 得到准确的共格相界面结构。将该方法与我们最近新发展的基于图神经网络的晶体结构预测方法[1]相结合, 成功地解决了 TiO₂ [2]与 Ga₂O₃ [3]等材料中关键的相变与相界面问题, 为基于界面亚稳物相的材料物性调控奠定了坚实的理论基础。

参考文献

[1] Li, C.-N.; Liang, H.-P.; Xu, S.; Wang, H.; Zhao, B.-Q.; Yang, J.; Zhang, X.; Lin, Z.; Wei, S.-H. J. Am. Chem. Soc. 2025, 147: 9544.

[2] Huang, Q.-S.; Zhang, Y.; Liu, P. F.; Yang, H. G.; Zhang, X.; Wei, S.-H. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2024, 121: e2318341121.

[3] Huang, Q.-S.; Li, C.-N.; Hao, M.-S.; Liang, H.-P.; Cai, X.; Yue, Y.; Kuznetsov, A.; Zhang, X.; Wei, S.-H. Phys. Rev. Lett. 2024, 133: 226101.

Z-72

金属间化合物和高熵合金中原子择优占位行为研究的必要性、方法和应用

吴波

福州大学

合金相由不同种类的合金元素和不同种类的亚晶格构成, 因此不同种类的合金元素在不同类型的亚晶格上必然存在择优占位行为 (Site Preference, 即占位倾向性)。择优占位行为的准确描述, 既是采用第一性原理计算合金相结构与性能的前提, 又是构筑合金热力学模型的基础, 然而原子择优占位行为却是长期悬而未决的难题。一方面, 原子择优占位行为的实验研究, 面临成本高、分析技术复杂; 另一方面, 目前尚缺乏合理有效的理论模型和求解方法。本报告梳理长期悬而未决的若干合金相的原子择优占位难题, 汇报我们在探索普适化模型和求解方法方面的新进展。搭建基于严格晶体学结构信息的亚晶格模型, 结合合金热力学和第一性原理计算, 即可对任意复杂合金相 (或体系) 进行有效的描述和求解, 且不受合金组元数和亚晶格个数的限制。我们对一系列简单合金相、复杂合金相, 尤其是高熵合金的择优占位行为等精细微结构和若干性质, 进行了理论预测和图像化表征, 基于精细结构进一步预测晶格畸变、力学、间隙原子扩散, 表面氧化和催化行为。但也迫切需要与精细中子散射等先进实验技术合作, 进行可靠性验证。

Z-73

通过随机轨道依赖局部扰动规避 DFT+U 中的亚稳态

邱睿智

中国工程物理研究院材料研究所

Hubbard 修正的密度泛函理论 (DFT+U) 被广泛用于预测关联电子材料物性质。然而, DFT+U 计算中存在的亚稳态解可能会妨碍可靠的预测。这一问题源于 DFT+U 中固有的轨道物理特性。为了解决这一

问题，我们提出了一种通过向局域轨道施加随机轨道依赖局部扰动来规避亚稳态的方法。这种扰动消除了 DFT+U 修正泛函中的轨道简并性，确保系统收敛到低能态。我们通过将这种方法与在几个测试案例中使用占据矩阵控制方案得到的结果进行比较来验证这种方法，这些测试案例包括 PuO_2 、 UO_2 、 $\beta\text{-Pu}_2\text{O}_3$ 和 NiO 。

Z-74

基于机器学习和第一性原理建立 Ti-Zr-Nb-Ta 高熵合金局部化学环境与间隙氧占位的定量映射关系

周婷婷、王琦*、帅茂兵

中国工程物理研究院材料研究所

协同提升材料强度与塑性是材料科学领域的长期挑战。最新研究表明，在 Ti-Zr 系难熔高熵合金中掺杂氧原子可有效打破传统金属材料中强塑性相互掣肘的困境，其性能提升源于间隙氧的择优占位特性。然而，氧占位行为本质上具有显著位置依赖性，严重受到局部化学环境影响，导致单个位点氧溶解能的定量预测极具挑战。本研究通过高通量第一性原理计算与机器学习方法，在 Ti-Zr-Nb-Ta 体系建立间隙氧原子溶解能预测模型。基于原子位置平滑重叠（SOAP）特征构建的机器学习模型，仅依靠初始未弛豫原子构型即可准确预测氧溶解能（拟合优度 $R^2 \approx 0.93$ ，平均绝对误差 $\text{MAE} = 0.11 \text{ eV}$ ），还实现了广域成分范围内氧占位规律与空间关联性的系统性分析。我们提出两个关键描述符——平均氧溶解能及其标准差，分别用以量化合金的整体氧亲和力及分布异质性。值得注意的是，这些描述符与实验报道的强度及延展性提升呈现强相关性，表明调控间隙氧占位是优化力学性能的关键机制。该工作揭示了高熵合金中氧固溶行为的基本规律，为实现含氧高熵合金的氧含量与分布的精准调控提供理论依据。

Z-75

机器学习力场“算不准”怎么办？Li₇La₃Zr₂O₁₂ 体系中的经验教训之谈

严子韩、朱一舟*

西湖大学

近年来，机器学习力场逐渐成为在复杂材料中进行分子动力学模拟中的强大工具。其广受欢迎的原因在于，能够保持计算效率并实现接近从头算的精度。机器学习力场使得大规模、长时间、高精度分子动力学模拟成为可能，允许我们在原子尺度上直接研究复杂材料的性质。对于固态电解质材料，机器学习力场使我们能够直接研究相变行为和离子传输机制等关键性质，从而为这些材料提供新的理解。

然而，一个根本性的挑战依然存在：当基于机器学习力场的模拟结果不如人意时，如何确定这些差异究竟是源于力场训练的局限性，还是源于被忽视的物理机制？

在本次报告中，我将分享我们在 Li₇La₃Zr₂O₁₂（LLZO）固态电解质材料中使用机器学习力场进行模拟的经验教训。我们发现，大多数用于力场训练的自动化迭代采样 workflow 存在欠拟合短程原子间相互作用的风险，这可能导致长时间或大规模分子动力学模拟中发生灾难性的不符合物理原则的失败。我们证明了可以通过引入经验势来描述短程原子间相互作用，从而有效解决这一问题，确保训练出来的力场在长时间和大尺度的模拟中保持稳健的性能。而且，这种方法还可以大大加快力场的训练过程并降低计算成本。

此外，尽管在立方相 LLZO 中计算的扩散激活能与实验值吻合良好，但我们在四方相 LLZO 中却观察到显著差异。我们发现，与立方相不同，Li-O 肖特基对缺陷在四方相 LLZO 的离子扩散中起主导作用。即使锂含量的轻微非化学计量比也会对四方相 LLZO 的离子扩散产生显著影响。

我们在 LLZO 中应用机器学习力场进行 MD 模拟的成功与失败（尤其是失败）可能为社区提供宝贵的见解，为将机器学习力场扩展到其他复杂材料系统提供实践教训。

Z-76

CuZr/O 和 CuZr/H/O 机器学习势的开发及其应用研究

杨昆、吕勇军*

北京理工大学

金属玻璃具有高硬度、高强度等优异的力学性能和耐腐蚀性能，呈现出巨大的应用价值。金属玻璃在含氧和超临界水环境中面临氧化与腐蚀等问题，借助分子动力学模拟方法从分子、原子尺度理解金属玻璃的氧化和腐蚀机理对于非晶合金的设计和应用都具有重要的理论意义。本研究基于前馈神经网络方法，使用对称函数作为原子描述符，开发了两个高精度的神经网络势（Neural Network Potential, NNP）：CuZr/O

和 CuZr/HO。CuZr/O 势专门针对于 CuZr 非晶合金与 O 相互作用体系；CuZr/HO 势用于描述 CuZr 非晶合金与水，特别是超临界水的相互作用。训练数据集通过第一性原理构建，覆盖了 Cu/Zr/H/O、Cu-Zr、CuZr/H/O(001)、CuZr/H₂O(001)、Cu-O、Zr-O、Cu-H、Zr-H、H-O 等多种吸附构型及反应中间体。

开发的两个 NNP 表现出优异的精度：在独立的测试集上，能量均方根误差均低于 45 meV/atom，原子力 RMSE 低于 0.15 eV/Å。NNP 预测的状态方程、径向分布函数等以及重要的反应能量学参数（如吸附能）与 DFT 结果符合很好。进一步测试表明这两个 NNP 在训练集外的系统中也具有较好的适用性。两个 NNP 势函数预测的 Cu₅₀Zr₅₀ 合金非晶转变温度分别为 805 K 和 795K，可比于常用的经典势函数的预测结果。CuZr/HO NNP 预测的液态水和超临界水的密度与实验结果符合较好。

借助 CuZr/O 系统 NNP 研究了微量 O 掺杂对 CuZr 非晶合金非晶形成能力影响的微观机理，揭示了 O 原子对局域动力学行为的影响规律。研究了 CuZr 非晶合金表面微量水分子和超临界水环境下水分子的吸附解离过程，探讨了表面水分子吸附对非晶动力学性质的影响规律。上述两个专用 NNP 的开发为深入研究非晶合金在各种复杂环境中的氧化过程及其对非晶合金服役性能的影响提供了可靠的力场支持，为金属玻璃的设计与耐腐蚀性能优化提供了理论依据。

Z-77

TiV 基中/高熵合金化学有序行为及氢化效应理论研究：基于团簇展开与蒙特卡洛模拟

陈亦杰¹、胡双林^{*1}、许灿辉¹、王月霞²

1. 中国工程物理研究院核物理与化学研究所

2. 复旦大学 现代物理研究所

基于第一性原理密度泛函理论（DFT），结合团簇展开（CE）与蒙特卡罗（MC）模拟方法，团队系统地研究了 TiV 基中、高熵合金（M/HEA）的相稳定性、纳米尺度微观组织和化学秩序演变、力学性能及储氢特性。研究表明，由伪二元偏析驱动的棘状分解是 TiV-M/HEA 在退火过程中元素重新分配的主要机制。进一步的力学性能分析揭示，与无序固溶态相比，局部有序相（B32 和 B2）的形成与较大的原子尺寸失配协同作用，有效提升了合金的屈服强度，凸显了局部化学有序（LCO）和相干界面对强化机制的积极贡献。此外，LCO 的引入显著降低了合金的氢溶解能；在特定氢浓度范围内，合金表现为 BCC 与 FCC 相共存的多相结构，LCO 的形成显著提高了 FCC 相的体积分数，改善了 BCC TiV-M/HEA 的储氢性能。本研究深入揭示了 TiV 基 M/HEA 的微观结构与性能之间的内在关系，为合金性能优化与应用开发提供了重要的理论依据。

Z-78

Research on machine learning interatomic potentials for titanium oxide ceramic materials

任佳丽

山东科技大学

Z-79

结合有效对势与整数规划的高效晶体结构全空间搜索方法

徐泉鑫

南方科技大学

晶体结构是固体材料性能的根本决定因素，因此结构预测在材料设计中具有重要意义。晶体结构预测（CSP）问题本质上是一个势能面上的全局优化问题，传统方法在搜索效率和精度之间难以兼顾。为此，我们提出了一种基于有效对势与整数规划的新型结构搜索方法——EP-AGEMS（Effective Pair Approximate Global Energy Minimization Searcher）。该方法以机器学习势函数构建模糊、近似的两体势，并在此基础上引入二次整数规划模型，利用数学规划算法快速生成低能结构。最终，通过高精度的机器学习势进一步筛选候选结构以提升预测质量。我们将 EP-AGEMS 应用于多个合金与半导体体系，在保持高效率的同时发现了大量稳定的新结构，验证了该方法在结构空间快速探索与材料发现中的潜力。

Z-80

高质量数据和领域知识协同驱动的电化学材料构效关系研究

施思齐

上海大学

数据驱动的机器学习在高性能电池材料构效关系挖掘及新材料发现方面表现出了优异的能力。然而，纯数据驱动的机器学习应用于解决该问题时面临三大关键矛盾，即高维度与小样本、模型准确性与易用性、模型学习结果与材料领域知识的矛盾。究其原因是数据质量治理的忽视和领域知识指导的欠缺。聚焦有效调和三大矛盾，本报告提出围绕“理论框架建立、高质量数据基础构建、可信知识获取以及高效模型构建”的解决方案，包括：数据品质与数量的协同治理、基于命名实体识别的描述符自动获取、基于特征选择的描述符筛选、分而治之的机器学习新模型构建，以期为解决机器学习助力电池材料构效关系挖掘存在的问题提供有效策略。

Z-81

锂镧锆氧固态电解质改性和界面设计的机器学习赋能研究

吴顺情

厦门大学

在全球高性能储能技术需求激增的背景下，全固态锂离子电池凭借卓越安全性与高能量密度，成为了储能领域前沿焦点。其中，锂镧锆氧（LLZO）固态电解质因优异的锂离子电导率和化学稳定性，被视为极具潜力的核心材料之一。本报告系统阐述我们在晶态与非晶态 LLZO 固态电解质改性及界面设计的创新成果。研究综合运用机器学习势函数与密度泛函理论等方法，深入剖析晶态与非晶态 LLZO 的锂离子电导率特性，提出针对性改性策略。鉴于晶界是固态电池失效的关键部位，我们重点研究锂离子在晶界处的迁移行为，揭示锂枝晶形成机制，并创新性提出晶界非晶化策略。该策略能有效抑制锂枝晶生长，为高性能固态电解质设计与安全界面结构构建提供了理论依据与实践路径，对推动全固态锂离子电池的实用化进程具有重要意义。

参考文献：

- [1] Nature Commun. 16, 4630 (2025)
- [2] ACS Appl. Mater. Interfaces 17, 32163 (2025)
- [3] npj Comput. Mater. 10, 57 (2024)
- [4] J. Power Sources 612, 234831 (2024)
- [5] J. Chem. Phys. 160, 114701 (2024)
- [6] ACS Materials Lett. 6, 1849 (2024)
- [7] ACS Appl. Energy Mater. 5, 15078 (2022)

Z-82

一种基于化学构建单元直观且高效地确定共价有机框架能带结构的方法

丁长春

西华大学

共价有机框架（COFs）的光学、电子以及（光）催化性能在很大程度上由它们的电子结构，特别是前沿的导带和价带所决定。在本研究中，我们建立了一种清晰的关联方式，用以揭示 COFs 的周期性电子结构与其单个分子构建单元轨道特性之间的关系——这是传统固态计算方法难以揭示的。作为示范，我们将该方法应用于五种具有不同框架拓扑结构的 COFs。我们的方法能够成功预测这些 COFs 的第一性原理导带和价带，并将其表示为 COF 片段上局域的前沿分子轨道的线性组合。我们进一步展示了该方法在快速探索化学修饰对 COFs 能带结构影响方面的能力，使其非常适用于发现新型功能材料的研究。

Z-83

维度一致新型高斯基组的开发及其在量子点材料电子结构研究中的应用

曾在平

河南大学

量子点是一种准零维的纳米材料，具有宽吸收窄发射、光谱连续可调和高量子产率等优异的光学特性，在发光二极管、太阳能电池和生物医学等领域都具有重要的应用前景。庞大的原子数目和复杂的表界面效应使得精确的量子点材料模拟面临巨大挑战。发展大尺度原子层次的计算方法是解决上述挑战的关键。本次报告将介绍团队在高精度小尺寸新型高斯基组的构建以及参数化区间分离密度泛函理论发展方面的最新进展。该理论框架成功实现了复杂环境下数千原子胶体量子点电子结构和激发态光学性质的全量子力学

精确模拟，为量子点光物理现象的解释、物理规律的预言及相关器件的设计提供强有力的理论支撑。

Z-84

多面体-集团势函数：锂电池材料跨尺度模拟新策略

方诺¹、任炳华¹、王继芬¹、邱吴劼*¹、刘建军²

1. 上海第二工业大学

2. 中国科学院上海硅酸盐研究所

跨尺度模拟方法在揭示复杂材料体系的结构演化和性能变化机制中发挥着关键作用，尤其在电池材料等新能源领域。近年来，基于机器学习的原子间势函数因其兼具高精度和高效性，逐渐成为连接量子力学计算与介观尺度模拟的桥梁，突破了传统第一性原理计算在时间尺度和计算成本上的瓶颈。然而，现有基于 SOAP 等描述符的机器学习势函数往往面临高维特征冗余和计算资源消耗大等挑战，限制了其在复杂多组分体系中的应用和跨尺度模拟的效率提升。因此，发展既能精确表征局部原子环境，又具备高效特征表达的机器学习势函数，成为亟待解决的关键问题。

本研究提出了一种“多面体-集团”势函数（Polyhedral-Cluster Potential, PCP）的机器学习势函数构建策略，其核心在于结合平滑原子位置（SOAP）描述符与多面体划分思想，实现对局部原子环境的高效且精确表征。PCP 方法在多面体内部完整保留 SOAP 描述符所包含的对称性和结构信息，同时通过“集团”间相互作用简化多面体之间的耦合关系，显著降低描述符冗余，提高计算效率。该势函数应用于三元锂离子电池正极材料 $\text{Li}_4\text{Mn}_3\text{TiO}_{12}$ 的跨尺度模拟，揭示了电极材料在循环过程中的不可逆结构演化及界面副反应机制，为理解其电压和容量衰减提供了微观基础。通过与第一性原理计算的对比验证，PCP 在力的预测上实现了平均绝对误差低于 $0.06 \text{ eV/\AA}$ 的高精度，显示出优异的性能和广泛的应用潜力。

本方法突破了传统局域描述符的限制，构建了通用且可扩展的原子环境描述框架，为多相界面结构、纳米尺度结构演化、异质界面与缺陷演化的跨尺度模拟与性能优化提供了有力工具，推动高性能长寿命锂电池材料的设计与开发。

Z-85

基于物理约束与贝叶斯推断的锂离子电池寿命预测

孙晨凯^{1,2}、方诺¹、宋二红²、邱吴劼*¹、刘建军²

1. 上海第二工业大学

2. 中国科学院上海硅酸盐研究所

锂离子电池是新能源汽车与储能系统的核心组件，其健康状态（SOH）的精准预测直接影响整机安全、运营成本和碳排放绩效。然而，电池老化伴随 SEI/CEI 膜生长、活性锂损失、结构相变及应力破坏等多物理耦合过程，单纯依赖统计模型难以解释退化机理，传统物理模型又难以覆盖复杂的非线性行为，二者之间的鸿沟长期制约着高可靠电池管理系统的发展。

本研究在系统梳理电化学退化机理的基础上，引入物理可微约束，将 SEI 膜增厚速率、界面阻抗演变与容量衰减规律融入 LSTM 深度网络训练，使模型输出天然遵循电化学守恒与热力学约束。同时构建基于扩展卡尔曼滤波的在线参数更新框架，使内阻、扩散系数等关键量随循环实时校正，保持长期跟踪能力。为捕捉早期退化信号，研究整合电压-电流-温度运行轨迹与电化学阻抗谱（EIS）频域特征，借助注意力机制自动聚焦不同老化阶段的敏感信息，并通过贝叶斯推断输出置信区间，为极端工况下的风险评估提供量化依据。

在当前阶段，已在 NASA 公共数据集以及少量自建电芯循环测试样本上进行了初步试验。结果显示，所提融合模型在 SOH 估计与早期退化捕捉方面相较纯数据方法表现更为稳定，平均绝对误差维持在可接受范围，并能给出合理的不确定性区间。

Z-86

Tunable Optical Responses in Anisotropic 2D Materials

Mingwen Zhao

School of Physics, Shandong University

Two-dimensional (2D) materials with significant in-plane anisotropic electronic properties provide a unique platform for exploring captivating optical phenomena observed in meta-hyperbolic surfaces. Hyperbolic materials,

characterized by hyperbolic dispersion relations for waves, have garnered considerable attention due to their distinctive equifrequency contours. In this talk, we introduce the concept of "bihyperbolicity" and establish a critical connection between the semiconducting properties of 2D materials and their hyperbolic characteristics. Through first-principles calculations, we demonstrate the applicability of this approach to materials like the recently synthesized bismuth monolayer. Our computations reveal that changing the type of semiconducting bismuth monolayers (n-type or p-type) can lead to a reversal of conductivity signs along two orthogonal directions, thereby enabling precise control over hyperbolicity [1]. The intriguing interplay between hyperbolicity and semi-conductivity lays the groundwork for creating in-plane hyperbolic heterostructures using established semiconductor technologies.

We also extend the concept of "hyperbolicity" to the electronic structure and correlate it with axis-dependent conduction polarity (ADCP), also known as goniopolarity, observed in highly anisotropic materials [2]. Additionally, we establish a correlation between electron hyperbolicity and light hyperbolicity, revealing fascinating scenarios arising from their interaction. The transition of electron hyperbolicity from type-I to type-II, induced by varying the electron chemical potential, similarly triggers a transition in light hyperbolicity. Through first-principles calculations, α -CaGe₂ is identified as a promising material for achieving this transition. The tunable optical responses of α -CaGe₂ under different doping conditions facilitate the creation of heterostructures, leading to the emergence of unique optical phenomena such as negative refraction and negative reflection [3]. The distinctive electronic states not only pave the way for further exploration of hyperbolic materials but also lay the foundation for designing innovative optoelectronic devices that broaden the functional possibilities of these intriguing materials.

REFERENCES

- [1] Xikui Ma, Shuting Hou, Mingzheng Wang, Yueheng Du, Chao Ding, Han Gao, Lei Sun, and Mingwen Zhao*, Tunable in-plane bihyperbolicity in bismuth monolayer, *Phys. Rev. B* 109, 195401 (2024).
- [2] Siyun Qi, Haoqiang Ai, Lei Sun, Xuejin Zhang, Mingwen Zhao*, Tunable axis-dependent conduction polarity in van der Waals materials, *Phys. Rev. B* 111, 035204 (2025).
- [3] Han Gao, Xuejin Zhang, Chao Ding, Mingzheng Wang, Juan Wang, Bo Yang, and Mingwen Zhao *, Electron and light hyperbolicity correlation in α -CaGe₂, *Phys. Rev. Res.* 7, 013023 (2025).

Z -87

几种新兴二维电子材料设计和器件模拟

毛宇亮

湘潭大学

二维材料的高通量计算可以有效地协助先进材料的研发,在大量未探索的材料中找到新的潜力材料候选者,并从稳定性与光电特性等多方面满足半导体器件的性能需求。在本报告中,我将汇报课题组最近运用第一性原理计算结合机器学习方法,开展二维卤化硅烯、锗烯以及碳化硅等新兴电子材料设计,并预测其光伏光催化应用性能的进展。与传统研究方法相比,该方法可以在减小计算资源消耗与缩短研究周期的基础上,实现二维新材料的计算设计,高效完成其稳定性与光电特性的高精度预测,并最终成功设计出具有光伏或者光催化应用潜力的二维电子材料和异质结。此外,汇报我们基于第一性原理计算开展石墨烯/Ga₂X₃(X = S, Se)铁电异质结设计,以及运用量子输运理论开展二维 InAs、二维 GeSe、二维 WSi₂N₄ 场效应晶体管等器件性能模拟方面的进展。

参考文献:

- [1] Ma and Mao et al., *Materials Today Chemistry* 41, 102302 (2024).
- [2] Hong and Mao et al., *The Journal of Physical Chemistry C* 128, 14282-14293 (2024).
- [3] Mao and Yao et al., *Applied Surface Science* 598, 153633 (2022).
- [4] Liu and Mao, *Appl. Phys. Lett.* 125, 043102 (2024).
- [5] Liu and Mao, *Journal of Materials Chemistry C*, 12, 7252-7259 (2024).
- [6] Mao and Deng et al., *Appl. Phys. Lett.* 124, 181106 (2024).

- [7] Mao and Chen et al., ACS Applied Electronic Materials 6, 5827-5832 (2024).
- [8] Liu and Mao et al., Journal of Materials Chemistry C, 12, 7252-7259 (2024)
- [9] Liu and Mao et al., ACS applied electronic materials 5, 6716 (2023).
- [10] Xie and Mao, Phys. Chem. Chem. Phys. 26, 28680-28688 (2024).
- [11] Liu and Mao, Phys. Chem. Chem. Phys. 27, 2083-2089 (2025).

Z -88**机器学习辅助金属表面小分子自组装的结构设计与预测**

王璐

苏州大学

小分子自组装通过分子间作用力可以在金属表面自发形成有序纳米结构（如二维网格、一维链状），而自组装规律的研究为原子制造提供了有效的分子设计策略。近年来，机器学习（ML）在材料科学中的应用为金属表面分子自组装行为的预测提供了新思路。聚焦于核苷碱基及其衍生物在金属表面的自组装行为预测，我们构建了包含 51 个实验样本（Au 和 Cu 表面）的数据集，结合密度泛函理论（DFT）计算数据与扫描隧道显微镜（STM）实验表征数据，提取了关键特征（如吸附能、电荷转移、分子与基底的距离等）。通过随机森林分类（RFC）模型，成功预测了小分子在金属表面组装后的结构维度（一维或二维）和结构多样性特征。模型在测试集上表现出较高的准确率，并通过三个新分子（次黄嘌呤、可可碱和胞嘧啶）的实验验证了预测的可靠性。特征重要性分析表明，氧原子数量（反映分子极性）和分子-金属基底之间的距离是影响自组装维度的核心因素。进一步预测了更为复杂的芳香化合物体系，并引入图神经网络（GNN）提升预测性能。通过对比 GNN、GAT 和 GIN 三种不同模型，发现 GAT 模型在分类任务和回归任务中表现最优，揭示了吸附能、电荷转移等因素对金属表面自组装类型的显著影响，强调了图神经网络在捕捉分子复杂相互作用中的优势。综上，机器学习算法与 DFT 计算数据、STM 实验表征数据的结合，为金属表面分子自组装行为的预测开辟了新的路径。

Z -89**五元环二维材料设计与预测**

明星*、雷文、彭科、陈博文

桂林理工大学

具有五元环结构的单层材料因其独特的褶皱结构，表现出高度各向异性的机械性质、光学性质和输运性质，是下一代电子器件与能源转换器件等领域潜在的候选材料。基于第一性原理计算模拟，我们对几种 2D 过渡金属化合物进行了结构预测和性质探索，首次确定了 PdSSe 的结构并研究了其在高压下的相变和超导电性[1-2]，首次提出 P21212 空间群二维五元环的平铺模式[3-5]，首次在五边形 PdSSe 单层中引入理想的 100%浓度的 SW 缺陷，获得了具有超高的载流子迁移率和超低晶格热导率的 SW 缺陷结构，以及在室温下表现出优异热电性能的I型和II型 PdSSe[6]。

Ming X, et al. Journal of Materials Chemistry C, 2021, 9: 7753-7764.

Ming X, et al. Physical Review B, 2022, 105: 115110.

Ming X, et al. International Journal of Hydrogen Energy, 2024, 80: 622-631.

Ming X, et al. International Journal of Hydrogen Energy, 2024, 87: 1121-1128.

Ming X, et al. ACS Applied Nano Materials, 2024, 7: 12499-12506.

Ming X, et al. Applied Physics Letters, 2024, 125: 253102.

Z -90**基于二维半导体的纳米晶体管的设计与性能模拟**

琚伟伟*、康梦硕、高攀、陈静、李同伟

河南科技大学

在后摩尔时代，传统硅基器件发展遇到较大瓶颈，需要采取新的技术或寻找新的材料来代替硅基器件。大量研究表明，诸多二维材料在力热光电磁等方面表现出了优异的性质，有望成为新型高性能纳米器件的重要候选材料。基于二维 半导体材料，我们模拟了两种类型的纳米晶体管：自旋场效应晶体管和亚 5 nm 场效应晶体管。下面我们分别对两种晶体管的结构及性能进行阐述。

1. 自旋场效应晶体管研究。自旋场效应晶体管由左右两端铁磁电极和中间具有自旋轨道耦合作用的半导体沟道区组成，自旋极化电子从铁磁电极一端注入，经过自旋轨道耦合沟道，进入另一铁磁电极。利用半导体沟道区的 Rashba 效应可以调制注入电子的自旋取向，使自旋产生进动，而进动角度可由栅电压对 Rashba 系数的调制加以控制。当自旋电流到达漏极时，其自旋极化与漏极的磁性相同，则自旋电流通畅无阻，晶体管呈现低电阻态；反之，若自旋极化与漏极的磁性相反，则晶体管呈现高电阻态。二维半导体 AlBi 和 SiPb 单层具有显著的内禀 Rashba 效应、薄的原子结构以及易克服的能量势垒，被认为是非常有前途的铁电 Rashba 半导体。我们采用第一性原理计算，系统研究了 AlBi 和 SiPb 单层的 Rashba 效应、电场响应和铁电性的调控。AlBi 和 SiPb 单层的 Rashba 系数高达 2.717 和 2.606 eVÅ，通过外加电场可以进行有效调节，两种材料对外电场的响应率约为 0.5 和 0.78 eÅ²，可以满足实际应用的要求。此外，作为典型的二维铁电材料，我们还探讨了铁电极化和自旋极化的耦合效应。基于这些研究，我们设计了两种以 AlBi 或 SiPb 单层为沟道的自旋场效应晶体管。仅基于电场响应而不考虑铁电性时，其沟道长度在 70 - 100 nm 之间。考虑铁电极化和自旋极化的耦合后，可以把沟道长度缩减至 2 nm 以下，远低于半导体中相干传输的容忍度。

2. 亚 5 nm 场效应晶体管研究。二维 GeTe 表现出与 Si/SiO₂ 衬底优异的界面兼容性，使其成为后硅时代场效应晶体管有效候选材料。我们通过第一性原理量子输运模拟研究了亚 5 nm 单层 GeTe 金属氧化物半导体场效应晶体管的性能。结果表明，无论沿锯齿方向还是扶手椅方向，n 型 GeTe 晶体管均可以很好地满足国际半导体技术路线图在 3 nm 栅长下的高性能应用标准，同时也可以满足 5 nm 栅长下的低功耗应用要求。沿锯齿方向和扶手椅方向的 5 nm 栅长的单层 GeTe 晶体管具有高达 2452 和 1917 μA/μm 的开态电流，其能量延迟积分别为 6.24×10⁻³⁰ 和 2.35×10⁻²⁹ Js/μm，优于多种二维半导体晶体管。我们的工作表明，单层 GeTe 作为沟道材料，可以将摩尔定律缩小至 5 nm 以下。

Z-91

金属修饰硼烯结构的理论设计及性质研究

马凤仙

河北师范大学

硼原子外壳层只有三个价电子，无法像石墨烯中的碳原子一样具备四电子体系，从而填满平面内的 sp² 成键态。因此，如何进一步提高二维硼单层的稳定性值得探索。我们基于第一性原理计算结合晶体结构预测的方法，通过过渡金属修饰硼单层的手段，发现了几种具有高稳定性的金属-硼单层材料，如 RuB₄, PtB₂, MoB₃, 单层等，并报道了材料中存在的拓扑催化、高磁转变温度、光致超快退磁等新奇物性。

Z-92

石墨烯生长动力学机制的理论研究

舒大军

南京大学

由于二维材料的性质通常依赖于原子层厚度，实现原子层厚度的大规模可控生长对其实际应用至关重要。从原子尺度系统理解范德华层状材料的生长机制有助于达成这一目标。针对较为广泛使用的化学气相沉积生长方法，我们将其与物理气相沉积进行了对应，并发展了经典生长动力学理论，使其能够利用约化参数构建生长动力学相图。结合第一性原理计算，我们实现了在铜衬底上石墨烯生长动力学相图的构建。该相图能够预测不同实验条件下单层/双层石墨烯生长模式，可为实验研究提供理论指导和预测，其研究方法对具有类石墨烯生长机制的其他二维材料研究具有启示意义。

Z-93

First-Principles Investigation of the Point Defects in 2D-SiC as Single-Photon Sources

Jijun Huang, Qiang Ke, Xueling Lei*

Jiangxi Normal University

Single-photon sources (SPS) based on solid-state point defects are significant for advancing quantum technologies. Two-dimensional (2D) semiconductor materials with open structure offer advantages such as high photon extraction efficiency and the ability to integrate with photonic circuits. Recently, two-dimensional silicon carbide (2D-SiC) has emerged as a potential host material for SPS. In this study, first-principles calculations

predict and identify two kinds of intrinsic point defects $V_{Si}V_C$ and $V_{Si}Si_C$ in 2D-SiC, which stabilities were confirmed through defect formation energies and binding energies. Among the eighteen identified transition pathways, two pathways $a_1 \rightarrow b_1^{(1)}$ and $a_1 \rightarrow b_1^{(2)}$ in the $V_{Si}V_C^-$ defect were selected based on their transition dipole moment (TDM) and ΔQ values, as they represent allowed optical transitions with superior optical properties. The results indicate that the pathway $a_1 \rightarrow b_1^{(2)}$ exhibits the smaller HR factor of 1.474 and the larger DW factor of 22.90%, and a short radiative lifetime of 3.4 ns. Additionally, the hyperfine tensor of the $V_{Si}V_C^-$ defect was calculated to facilitate the identification of defect centers. Our findings indicate that the $V_{Si}V_C^-$ defect in 2D-SiC is a potential candidate for SPS.

Z-94

二维材料晶体设计与外延生长机理研究

董际臣

中国科学院化学研究所

二维纳米材料独特的结构及量子限域效应使该类材料在信息与能源等领域具有广泛的应用前景。设计具有优异物理化学性能的二维材料并可控制备其高质量样品是研究其性质及应用的前提。第一性原理计算、分子动力学模拟等多尺度方法可在原子尺度研究材料的性质与制备机理提供深入理解。本次报告将从多尺度理论模拟的角度讲述报告人在理论设计二维材料及可控制备二维材料机理方面取得的一些研究进展。

[1] Dong Jichen, et al., Nat. Commun., 2020, 11: 5862.

[2] Jichen Dong, et al., ACS Nano, 2023, 17: 127-136.

[3] Huang Haojie, et al., Adv. Funct. Mater., 2024, 2400380.

[4] Huang Haojie, et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2025, e202417457.

[5] Xia Ming, Nat. Synth., 2025, 4, 380-390.

Z-95

绝缘衬底单层单晶可控生长机理研究

魏文姬

华南师范大学

二维材料具有独特的表面结构，优异的物理化学性质，有望成为下一代电子器件的核心备选材料。单层是二维材料的结构基础，其高质量单晶的可控生长及是推动二维材料发展及应用的关键，特别是与半导体技术兼容衬底（例如：绝缘衬底，锗）上生长的二维材料可避免复杂转移过程，具有显著的器件应用潜力。然而，绝缘衬底表界面耦合势较弱，二维成核困难。此外，多取向成核产生大量晶界和缺陷。本报告将详细介绍我们针对绝缘衬底单晶可控生长机理的研究进展。

为突破绝缘衬底生长局限并降低单晶生长难度，我们提出多项原创性生长机制：1）针对绝缘衬底-二维材料表面耦合势较弱导致的成核难题，提出“原子级印章”生长模式。理论研究发现升温可使绝缘衬底熔融，增强分子热运动使界面产生分子间吸引力（ $d \sim 1\text{nm}$ ），进而形成稳定构型（ $d \sim 0.3\text{nm}$ ），基于该物理机制成功实现二维单晶从金属向绝缘衬底表面高效转移[1]；（2）针对台阶边界-二维材料耦合势较弱导致多取向成核的难题，提出精确时间序列调控的生长机制。理论研究发现，台阶重构中未成熟氧缺陷和二维材料具有更强的边界耦合势，利用该阶段衬底可显著提升二维材料在台阶边界成核率，解决单晶制备困难的问题[2]；（3）根据晶面构型，提出筛选高指数衬底面实现单一形核取向的生长机制。理论研究发现二维材料形核率与衬底面积成正比，增大斜切角可有效抑制平面形核，同时保持台阶边界单一取向形核优势[3]。而为了生长形状手性可控的二维纳米带，设计多重界面耦合原子制造，实现兼具可控手性及相干极性的 TMDs 条带阵列的“全同”控制制造，为一维结构的原子级精准制造提供了定制化方案[4]。

这些研究为单层单晶可控生长提供新的理论框架并推动实验制备。

[1] FK Zeng#, R Wang#, WY Wei#, ..., KH Liu*, XZ Xu*. Nature Communications 2023, 14, 6421

[2] PM Zheng#, WY Wei#, ZH Liang#...F Ding*, KH Liu*, XZ Xu*. Nat. Commun. 2023,14, 592.

[3] PL Li, WY Wei#...QH Yuan*, ZF Di*. Nano today 2020, 100908.

[4] GD Xue#, ZQ Zhou#, QL Guo#, YG Zuo#, WY Wei...F Ding*, ZM Wei*, C Liu*, KH Liu*. Science 2024, 384,1100-1104.

Z-96

二维层状材料中的手性光学响应

丁超

山东师范大学

手性的光-物质相互作用在生物学、医学和药物研发领域有重要的应用。天然的二维材料为光-物质相互作用提供了优秀平台，其手性的光学响应能够为手性光的产生和调控提供有效手段。二维层状材料中可操纵的晶格结构和体系对称性为光学响应的调控提供了丰富的自由度。本论文利用线性响应理论及电磁场理论，研究了一般的二维双层材料的手性光学响应特性，引入了手性光导率这一反映手性光学响应的特征量，揭示了体系镜面对称性及空间反演对称性的破缺是实现手性光学响应的必要条件。以偏压下的双层石墨烯为模型体系研究了其中的手性光学响应特性，揭示了偏压、载流子浓度和层间滑移对手性光学响应的调控机制。极化激元能够显著增强光与物质间的耦合，本论文研究了单层材料中极化激元光场的手性特性，揭示了二维各向异性的单层材料能够产生手性的极化激元光场。本论文为二维层状材料中手性光学响应的产生和调控提供理论基础。

Z-97

The role of Ag(111) substrate on electronic properties in 3d transition metal atoms adsorbed at β -12-borophene surface

Ruida Lu, Zhenpeng Hu*

Nankai University

Using spin-polarized density functional theory (DFT), we systematically investigate the Ag(111) substrate's influence on the electronic and magnetic properties of 3d transition metal (TM) atoms (Cr, Mn, Fe, Co) adsorbed on β -12-borophene. The substrate significantly suppresses borophene deformation and enhances structural stability. TM atoms exhibit exothermic adsorption at the energetically favorable hollow site of β -12-borophene. Crucially, the Ag(111) substrate modulates both magnetic moments and charge transfer in TM atoms, inducing d-orbital electron splitting that drives magnetic variations. This work elucidates the substrate's critical role in borophene-based nanosystems and provides a theoretical foundation for magnetic control and designing novel magnetic materials.

Z-98

机器学习势驱动的碳薄膜沉积生长及其机制分析

刘玉涛、高廷红*

贵州大学

碳薄膜可控生长的理论研究对于碳基器件的实验制备具有重要指导意义，但其沉积过程的高精度模拟仍面临诸多挑战。为此，本研究构建了一种主动学习驱动的机器学习势函数构建流程，并开发了基于 NEP 的势函数，用于模拟碳原子在多种衬底上的沉积生长行为。通过将分子动力学与蒙特卡洛方法相结合，系统研究了碳在 Si(111) 衬底上的沉积过程，结果表明，沉积能量对成键拓扑结构与薄膜形貌具有显著影响。所构建的 NEP 能准确捕捉碳原子的表面扩散行为及碳链、碳环等中间结构的形成过程，并揭示了低能量下以粘附驱动为主、以及高能量下以轰击致密化为主的两种典型生长机制。进一步地，为验证势函数的可迁移性，将其扩展应用于 Cu(111) 与 $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ 衬底的碳沉积模拟，结果显示 NEP 能够再现 Cu(111) 表面碳原子沉积过程中石墨烯形成的多个关键子过程，而在 $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ 衬底上则仅观察到无序碳链结构。该研究不仅揭示了典型衬底上碳薄膜的原子级生长机制，也建立了适用于多种碳纳米结构可控合成的通用计算框架。

Z-99

低维材料界面物性调控及表面智能识别

杜世萱*、潘金波

中国科学院物理研究所

二维(2D)材料由于具有原子级厚度且无悬挂键的特性，为通过同质、异质界面工程精确调控物性提供了独特平台。本报告重点展示两方面的工作。首先介绍界面调控新物性。通过磁近邻效应诱导出母体材料原本不具备的新奇物性，包括磁斯格明子、自旋极化、能带拓扑、能谷极化以及非线性光学性质等。其

次介绍表面吸附物的智能识别。扫描隧道显微镜 (STM) 成像机制基于表面吸附物的电子态密度分布, 难以直接解析分子空间构型, 致使结构及形貌高度近似的吸附物无法有效区分。为此, 我们开发了基于卷积神经网络 (CNN) 的 ReSTOLO 框架, 该框架专精于 STM 图像中稀疏分布的多种类分子的高精度检测与识别, 尤其适用于特征相似分子的甄别。其核心架构通过检测框调整模块串联双 CNN 模型: YOLO v5.m 负责分子定位, ResNet-101 执行分类识别。依托基于物理与实验先验知识增强构建的单分子 STM 图像数据库进行训练, 本框架成功实现了六类分子 (其中四类非常相似) 的精准辨别。在复杂表面反应体系分析中, ReSTOLO 展现出卓越的自动化定位与区分能力, 其精确率 (precision)、召回率 (recall) 及准确率 (accuracy) 较传统方法提升约 20%。

参考文献

- [1] Zhu, Y. et al. Phys. Rev. Lett. 2025, 134: 046403.
- [2] Li, P. et al. Nano Lett. 2024, 24: 2345.
- [3] Pan, J. et al. Nano Lett. 2024, 24: 14909.
- [4] Yang J. et al. J. Am. Chem. Soc. 2024, 146: 21160.
- [5] Yang J. et al. Adv. Funct. Mater. 2023, 2305731.
- [6] Wei, Z. et al. J. Am. Chem. Soc. in revision.

Z-100

Quantifying Humidity Effects on Commensurability-Dependent Friction in Bilayer Graphene Using a Generalized Registry Index Framework

Shunfang Li

Zhengzhou University

Deciphering the atomistic mechanism governing humidity-dependent interfacial friction remains a fundamental challenge spanning physics, chemistry, medicine, and materials science. Here, we employ first-principles calculations to systematically compare friction behaviors in commensurate and incommensurate contacts of bilayer graphene (BLG), with confined interfacial water (H_2O) coverage modulated by humidity. Our results reveal a striking dichotomy: as H_2O coverage approaches ~ 0.4 monolayer, commensurate contacts exhibit a dramatic friction reduction (reaching minimum value), whereas incommensurate contacts show a slight friction increase (peaking at maximum) up to ~ 0.6 monolayer. Beyond such critical coverages, friction in commensurate configurations gradually rises toward saturation, while incommensurate systems display a declining trend before plateauing. To elucidate these phenomena, we propose a generalized registry index (GRI) framework that extends the conventional model by incorporating three critical factors: Interlayer-distance-dependent van der Waals interactions modulated by water intercalation; Humidity-induced commensurate-incommensurate phase transitions; Pinning effects arising from H_2O molecules within the BLG heterostructure.

Z-101

基于低维 TMDs 的范德华异质结光电特性调控的 ABR/DFT 研究

欧阳钢

湖南师范大学

二维过渡金属硫族化合物 (TMDs) 因其独特的物理和化学性质在光电材料领域内展现出巨大的潜力, 近年来得到了广泛的关注。然而, 单层 TMDs 中光生载流子的快速复合严重制约了其光电性能。构建范德华异质结不仅能保留单层结构的优异特性, 还可衍生出新颖的物理现象。为阐述基于 TMDs 的范德华异质结体系结构与光电特性的关系, 我们从原子尺度提出了 0D-PbS_xSe_{1-x}/1D-MoS₂ 范德华异质结中开路电压和界面电荷转移态能量之间的理论模型, 通过调控组分和尺寸, 能级对齐将从 II 型转变至 I 型, 使其可应用于不同类型的光电器件。相比 PbSe/MoS₂ 和 PbS_xSe_{1-x}/MoS₂ 0D/1D 范德华异质结, PbS/MoS₂ 体系的光吸收率和光电转换效率 (PCE) 更高, 优化后的 PCE 可达 12.54%。在 1D 范德华异质结中, 构筑了基于 1D MoSSe/WSe₂ 的太阳电池模型, 研究了挠曲电效应和电负性差异对光电特性的影响, 发现 AB1 构型表现出超快的界面电荷转移行为, 其光生电子和空穴转移过程分别在 55 和 17 fs 内完成, 其 PCE 可达 6.25%, 高于 1D MoS₂/WSe₂ 的 5.45% 和 2D MoSSe/WSe₂ 的 1.94%。在 2D 范德华异质结中, 搭建了 2H-MoSSe/MoS₂

结构, 发展了电场和偶极矩与光电性质之间的理论模型, 发现当外电场与偶极电场的方向相同时, 体系的界面电荷转移速率得到提升, 即 Se/S 体系中光生电子(空穴)的转移时间为 152 (160) fs; 在 0.1 (-0.3) V/Å 的电场下, Se/S (S/S) 结构的最优 PCE 为 4.67% (4.26%), 光响应度为 1093 (223) A/W。我们的结果为 TMD 基高性能多功能光电器件的研制提供了理论参考。

参考文献

[1] B. Cai, J. Tan, L. Zhang, D. Xu, J. Dong, G. Ouyang*, Ultrafast interfacial charge transfer and superior photoelectric conversion properties in one-dimensional Janus-MoSSe/WSe₂ van der Waals heterostructures, *Physical Review B* 108, (2023) 045416.

[2] B. Cai, Y. Zhao, D. Xu, G. Ouyang*, Optimized photoelectric conversion properties of PbS_xSe_{1-x}-QD/MoS₂-NT 0D-1D mixed-dimensional van der Waals heterostructures, *New Journal of Physics* 24, (2022) 063012.

[3] X. Y. Li, C. R. Shao, Y. P. Zhao, G. Ouyang*, W. Hu*, J. F. Zhang*, Pyramid-shaped perovskite single-crystal growth and application for high-performance photodetector, *Advanced Optical Materials* 2400329 (2024).

[4] Y. Wang, M. Ge, J. Tan, B. Cai, G. Ouyang*, Dipole-moment modulation of photovoltaic and photoresponse properties in 2H-MoSSe/MoS₂ van der Waals heterojunctions under electric field, *Sci. China Inf. Sci.* 68, (2025) 159402.

Z-102

极性扭转双层二维材料的电子结构与物性调控

赵兴举

郑州大学

电子布洛赫平带的存在为强关联体系中新奇量子效应的实现提供了重要途径。尽管扭转双层石墨烯中基于魔角机制的平带形成理论已较为成熟, 然而在二维极性扭转双层体系中, 平带的形成机理仍存在诸多未解之谜。本研究采用第一性原理计算方法, 揭示了极性扭转双层体系中平带形成的物理机制: 由于组成元素间的本征极性特征, 当扭转角度低于临界值时, 体系会自发形成平带结构。以六方氮化硼扭转双层体系为研究对象, 结合密度泛函理论和紧束缚模型计算, 我们发现平带的形成源于莫尔超晶格中阴离子堆叠区域的最高占据态以及阳离子堆叠区域的最低未占据态在堆叠作用下的解耦效应。这一发现不仅突破了传统魔角机制的限制, 为极性材料的平带研究开辟了新方向, 而且为分数量子反常霍尔效应等拓扑量子态的探索提供了重要的理论指导。

Z-103

低维材料中的光致伸缩效应和超快动力学研究

张进

国家纳米科学中心

光学激发能为理解相关粒子相互作用和过程提供有效的途径。纳米材料与量子材料中的激发态动力学过程已经成为相关领域的研究重点。本次报告中将重点介绍: 1, 光电子材料中的光致伸缩与光激发晶格动力学过程; 2, 纳米材料中光激发诱导的激发态电荷动力学和非线性光学响应机制。这些工作对新型纳米材料中激发态性质进行了探索, 为纳米电子器件、光伏器件等应用提供了重要的理论参考。

Z-104

层状材料中可调谐的晶角极性现象研究

齐思云

山东师范大学

在层状材料中观察到沿方向依赖传导极性 (Axis-dependent conduction polarity, ADCP) 现象, 即材料沿某一方向呈 p 型传导而沿另一方向呈 n 型传导, 为设计新型电子器件提供了新思路。然而, 此类材料的稀缺性限制了其应用。我们的研究发现, 该特性与材料能带结构中的鞍点及双曲费米面相关。在此基础上, 我们基于紧束缚模型建立了费米面形状、掺杂载流子类型与化学势之间的关系, 为理解晶角极性现象提供了理论依据。第一性原理计算表明, 电子掺杂的层状二硼化物 (如 MgB₂、CaB₂、SrB₂) 可呈现显著的晶

角极性，其在不同晶向上相反符号的塞贝克系数验证了这一特性。此外，在 AA 堆垛的范德华材料 MA_2Z_4 中，我们结合紧束缚模型和第一性原理计算表明，其晶角极性源于 Mo 的 d 轨道中跨 MoN_2 层的相互作用，造成沿面内和面外方向塞贝克系数符号相反且数值差异显著。这些发现为利用层状材料设计晶角极性材料、调控其特性及优化热电器件输运性能提供了策略，有助于推动新一代电子和热电器件的发展。

Z-105

Moiré Engineering of Defect Patterns and Phonon Chirality in 2D Materials

Lei Liu

Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences

Recent advances in moiré superlattices offer unprecedented opportunities for tailoring the quantum properties of two-dimensional (2D) materials at the atomic scale. In this talk, I will present a multi-faceted theoretical and computational exploration into the role of moiré physics in defect engineering and collective phonon behavior. First, we demonstrate a high-throughput strategy to pattern single sulfur vacancies in MoS_2 with sub-nanometer precision by harnessing moiré potentials at the $\text{MoS}_2/\text{Au}(111)$ interface, enabled by localized out-of-plane acoustic phonon condensation. This approach paves a viable route toward scalable defect-based quantum systems. Second, we explore oxidation energetics in MoS_2 and WS_2 , revealing why only MoS_2 favors vacancy creation, rooted in orbital-specific bonding and metal-chalcogen hybridization. Third, we report the first theoretical prediction and experimental observation of non-local chiral acoustic phonons at the moiré Brillouin-zone center of twisted bilayer MoS_2 . These phonons, excited and resolved via circularly polarized Raman spectroscopy, exhibit energy splitting driven by a pseudo-magnetic field intrinsically arising from structural chirality. Our results may expand the scope of moiré physics into phononic and quantum defect domains, offering new design principles for valleytronic, phononic, and quantum photonic applications in next-generation low-dimensional devices.

Z-106

k-projection 能带反折叠方法在摩尔晶格中的应用

陈明星

湖南师范大学物理与电子科学学院

由双层转角结构形成的摩尔晶格已经成为人们探索新奇物理效应和现象的理想平台。这类体系最关键的特征是转角小到一定角度时形成电子平带。然而，这也给第一性原理计算其电子结构带来了挑战。一方面，双层转角体系原子数目巨大，使得第一性原理计算非常耗时。另一方面，由于这类体系是一个巨大的超胞结构。对于过渡金属硫族化合物 (TMD)，其 Γ 谷和 K 谷能量相近。这两类能谷形成的平带表现出截然不同的性质，但在摩尔晶格中形成的平带会混合在一起，难以分辨。本报告将介绍我们最近在过渡金属硫族化合物莫尔晶格电子结构计算方面的进展。我们将自主发展的 k-projection 能带反折叠方法与深度学习哈密顿量方法相结合研究 TMD 的电子结构、平带的演化及起源，揭示摩尔晶格中平带的形成机制，解释 R 堆叠和 H 堆叠摩尔晶格平带的差异，发现 Γ 谷和 K 谷两类平带随角度演化的截然不同的特性。

参考文献:

[1] Mingxing Chen* and M. Weinert, Layer k-projection and unfolding electronic bands at interfaces, *Phys. Rev. B* 98, 245421 (2018).

[2] Shengguo Yang, Jiaxin Chen, Chao-Fei Liu, and Mingxing Chen*, Evolution of flat bands in $\text{MoSe}_2/\text{WSe}_2$ moire lattices: A study combining machine learning and band unfolding methods, *Phys. Rev. B* 110, 235410 (2024).

[3] Haipeng Zhao#, Shengguo Yang#, Cuihuan Ge, Danliang Zhang, Lanyu Huang, Mingxing Chen*, Anlian Pan*, Xiao Wang*, Tunable Out-of-Plane Reconstructions in Moiré Superlattices of Transition Metal Dichalcogenide Heterobilayers, *ACS Nano* 18, 27479 (2024).

[4] Jiaxin Chen, M. Weinert, and Mingxing Chen*, KPROJ: a program for unfolding electronic and phononic bands, *Comput. Phys. Commun.* 312, 109614 (2025).

Z-107

二硫化钼莫尔超晶格中的关联电子态

康俊

北京计算科学研究中心

转角二维材料形成的莫尔超晶格中，层间的界面相互作用将导致电子态的强烈局域化。这使得莫尔超晶格成为模拟强关联系统和研究强关联物理的理想平台。如何基于莫尔超晶格实现各类强关联模型是当前的研究热点。本次报告将介绍我们近期在莫尔超晶格电子结构计算方面的相关进展。基于大规模电子结构计算，我们提出在二硫化钼莫尔超晶格中可构建扩展哈伯德、离子哈伯德等复杂强关联格点模型，并实现莫特绝缘态、电荷密度波、自旋密度波、超导等多种强关联新奇物相。相关结果为莫尔超晶格中新奇量子效应的操控提供了理论参考。

参考文献

1. Kang J, Nano Lett. 2025; 25 (1): 84–90.
2. Zhong H, Su Z, Kang J, Adv. Funct. Mater. 2024; 34 (11): 2311814.

Z-108

金属轻元素化合物结构预测和物性调控研究

卢成*、尹路寒、陈晨、向志洋、黄澍

中国地质大学（武汉）

以轻元素为基础结合过渡金属元素所形成的化合物，在极端条件下常常会表现出优异的物理性能。在极端条件下由于轻元素的高频振动，导致较强的电声耦合，使其成为潜在的高温超导材料。实验上在高压条件下合成并表征 LaH₁₀ 化合物具有 $T_c \sim 250\text{K}$ 的高温超导特性，从而引起了科研工作者对镧系氢化物的广泛研究。通过对整个富氢化合物和硼碳化合物的结构演化研究，得到了一系列稳定富氢和硼碳基超导体。对于富氢化合物，一般它们具有较高的超导转变温度，但是它们所需的合成压力都非常高，通常需要 100GPa 甚至更高的合成压力，并且这些在高压下合成的超导体通常很难保留到常压。因此，寻找实验容易合成同时常压下能够保持稳定的高温超导体就显得至关重要。运用晶体结构预测方法，在常压下找到了一系列稳定的硼碳基高温超导体，部分超导体的超导转变温度高达 80K。本报告从结构预测和超导机制两个方面，详细讨论了极端条件下轻元素基化合物和硼碳化合物的结构演化和超导机理。

Z-109

Moiré and More: Flat Bands, Polarization, and Beyond

Xianghua Kong

Shenzhen University

Many exotic electronic states have been discovered in moiré superlattices formed by stacking two-dimensional (2D) materials, often driven by the formation of flat electronic bands. In this talk, we first present a novel strategy for constructing moiré superlattices in homo-bilayers through layer-dependent in-plane strain, rather than twisting. When considering out-of-plane relaxation effects, moiré superlattices fabricated by this approach exhibit spatially distinct electronic states with strongly modulated properties. Specifically, in untwisted bilayer graphene under gradient strain, we identify kagome-like interlayer spacing distributions, resulting in strain-tunable kagome electronic bands near the Fermi level. Furthermore, we discuss the emergence of atomic-scale polarization textures arising from moiré charge density reconstructions in twisted antiferroelectric systems, strain-engineered homostructures, and lattice-mismatched heterostructures, highlighting phenomena inaccessible to existing sliding models. Lastly, we introduce a generalized moiré crystallography framework capable of extracting geometric parameters from imaging data across bilayer systems, even when direct bottom-layer imaging is experimentally challenging. Our integrated approach provides new insights and methodologies for deterministic engineering of moiré-induced quantum phenomena.

Z-110

AlN/ScN 超晶格材料多功能特性理论研究

姜志军

西安交通大学

AlN/ScN 氮化物超晶格材料通过交替生长 AlN 与 ScN 层形成周期性结构, 在铁电、压电及光电领域展现出显著优势。本研究系统揭示了外延应变对 AlN/ScN 超晶格能量、结构、电学、电子、光学性质、能量存储以及畴结构的影响。研究表明: AlN/ScN 超晶格材料拥有不同的应变区域, 在不同的应变区域下会表现出优化的各种物理响应, 例如: 光电效应、压电效应和弹光效应等[1], 其中非极性初始态在特定应变条件下可实现高达 200 J/cm 的能量密度以及 100%的理想储能效率[2]。进一步理论预测表明, AlN/ScN 超晶格多畴在不同的应变范围内存在不同的应变区域, 这些区域都具有显著的结构特征, 当压缩应变超过-5.5%时会出现弯曲的畴结构[3]。该工作通过应变工程构建了结构-性能关联图谱, 明确了不同应变区域下晶格动力学、光学及介电等响应的物理起源, 为实验制备具有可调控铁电/压电/光电多功能特性的新型氮化物超晶格材料提供了理论支撑。

[1] Z. Jiang, et al. Designing multifunctionality via assembling dissimilar materials: epitaxial AlN/ScN superlattices, Phys. Rev. Lett. 123, 096801 (2019).

[2] Z. Jiang, et al. Ultrahigh energy storage density in epitaxial AlN/ScN superlattices, Phys. Rev. Mater. 5, L072401 (2021).

[3] Z. Jiang, et al. Strain-induced bent domains in ferroelectric nitrides, Phys. Rev. B 110, 054101 (2024).

Z-111

第一性原理计算预测氢化/卤化硼烯诱导无质量 Dirac 费米子

孟令彪

中物院激光聚变研究中心

The striking electronic characteristics of graphene trigger immense interests and continual explorations for new two-dimensional (2D) Dirac materials. By first-principles electronic structure calculations, we here identify a new set of 2D semimetals in hydro-/halogen embedding trigonal $\delta 6$ borophene, namely $\delta 6$ -B3X (X = H, F, Cl), that possess the graphene-like massless Dirac fermions. Owing to the central hollow B atoms strongly hybridized to the hydro-/halogen adatoms, adequate charge transfer is induced from the hollow B to the basal honeycomb B sublattice, which electronically stabilizes the 2D sheet and decisively endows a robust (intrinsic and stable-against-strains) graphene-like Dirac cone state. The predicted high energetic, dynamic and thermal stabilities, combined with pretty geometrical match to the commonly utilized Ag/Au(111) substrates, support their experimental viabilities. Our prediction provides a new branch for exploring the intriguing 2D Dirac fermionic states in versatile boron element and its derivatives.

Z-112

类 MXenes 材料 MOenes 的结构设计与物性的理论研究

燕罗

南华大学

二维过渡金属碳化物、氮化物和碳氮化物 (MXenes) 表现出丰富的晶体结构和物理化学性质, 使其广泛应用于能量存储和收集、环境应用、光电子、传感器、生物医学以及电磁干扰屏蔽和天线。目前对于 MXenes 的晶体调控主要集中在“M”位、化学计量比、表面官能团、以及固溶体的形成。然而, 对其“X”位的调控却十分稀少。最近, 超低能二次离子质谱证实碳氧化物 $Ti_3C_{1.4}O_{0.6}T_x$ MXenes 的存在。基于此, 我们设计单层 $Ti_{n+1}O_nT_2$ ($n = 1-3$), 将 MXenes 的“X”位由碳/氮元素扩展到氧族元素, 从而创建了一类新的二维材料家族, 称为 MOenes。此外, 我们将钛基 MOenes 扩展到 $M_{n+1}O_nT_x$ MOenes ($M = \text{early transition metals}$; $O = O, S, Se, Te$; $T = F, H, O, OH$; $n = 1, 2$) 家族材料。为了促进此类新兴 MOenes 的研究和开发, 我们建立了一个公共数据库 (moenes.online), 其中包含晶体结构参数、力学性能、电子结构以及声子相关性质。我们的研究表明, MOenes 家族材料在电子化合物、超导电性、负极材料、量子相变、红外探测、太阳能电池、拓扑半金属/绝缘体、电催化、压电以及谷电子等领域展现出丰富的物性。显然, MOenes 家族材料的

探索之旅绝不止局限于当下这些研究。就如同 MXenes 一样，MOenes 同样拥有着丰富的晶体结构，而其诸多的性质与应用前景，也值得我们在未来投入更多精力去深入挖掘与探索。

Z-113**Zn 基氧化物催化剂表界面结构及其催化功能**

傅钢

厦门大学

Z-114**金属氧化物表面结构、电子性质影响析氧机制的探索**

李希波

暨南大学

内容围绕基于钨基氧化物、镍基氢氧化物表面展开，阐述其表面结构、电子性质等影响析氧活性的机制，以达到催化剂稳定性及活性的统一。其中，掺杂影响金属氧化物的稳定背后的电子性质，电子性质与活性的关联，将给予描述。

Z-115**纳米颗粒表面异构极化及离子特异性吸附研究**

李柱杰

山东交通学院

金属纳米颗粒已经被广泛应用于生物医学、催化等领域，其在应用中的性能关键取决于界面结构特性，其中纳米颗粒表面性质是影响水合作用、离子吸附和电化学反应的关键特性之一。我们使用分子动力学方法研究了金纳米颗粒（直径 1-3nm）在多种钠盐水溶液中的溶剂化和静电性质，以及表面极化对双电层和静电势等性质的影响。研究发现，无论是在非极化还是极化的金纳米颗粒模型中，均发现了离子在纳米颗粒表面的特异性吸附特征，且吸附结构与空间分布具有显著的晶面选择性。在极化模型中，研究发现纳米颗粒表面的极化和静电势存在显著的空间异质性，这种异质性由界面水分子的高度晶面依赖性结构所介导。同时，离子特异性、晶面依赖性的离子吸附会导致界面极化的显著改变。与非极化纳米颗粒相比，表面极化仅略微改变水分子的局部偶极密度，但对表面静电势有显著影响，并导致纳米颗粒表面吸附离子的重构。研究表明极化模型中的显式电荷响应对于准确描述和解释金属纳米颗粒界面静电特性（例如催化与电化学中的电荷转移和界面极化）至关重要。

Z-116**锂电池电解液电极界面模拟**

陈翔

清华大学

电解液与电极界面双电层结构是电化学研究的核心问题之一。本报告通过恒电势分子动力学模拟方法揭示了电解液与负极界面双电层结构与性质，发现了电极表面结构调控双电层结构的机制及双电层结构与电极电势的响应关系；发展机器学习分子动力学模拟方法，探究电解液界面反应的微观机制，揭示了有机溶剂分子及锂盐阴离子界面分解生成固态电解质界面膜的化学原理。相关工作深化了对锂电池电解液界面结构与化学机制的理解，为下一代锂电池材料设计提供了重要理论参考。

参考文献：

[1] J. Energy Chem. 2024, 93, 299–305.

[2] J. Mater. Chem. A 2023, 11, 11078–11088.

Z-117**晶界对催化剂性能影响的第一性原理研究**

田之雪

河北师范大学

晶界（grain boundary, GB）是多晶材料中普遍存在的界面缺陷，它与晶粒内部及其缺陷结构一样，决定着晶体的性质。随着对晶界特性的深入研究和调控，我们除了可以改进材料的性能外，还可设计出新型材料和元器件。在块状材料中，几乎所有的晶界都是埋在晶粒内的，很少有人关注它们对表面性能的影响。

最近, 晶界工程作为一种缺陷工程手段, 已经成为提高电催化性能的可行且有力的途径。晶界的存在可以显著提高电催化活性。表面上的“晶界@表面的交汇区”与材料的催化活性之间存在着紧密的联系, 这为开发新型载体纳米表面提供新的设计思路。

我们首次系统研究了 Rh_n ($n = 1\sim 8$) 小团簇在 $\text{MgO } \Sigma 5(210)$ 晶界@ (001) 表面上的几何结构、电子结构性质, 以及对 NO 的吸附和分解作用。研究发现, 在捕获和分解 NO 方面表现出色的最佳 Rh_n 团簇并非最稳定的结构, 而是维度相对较低的且与衬底结合强度适中的团簇。这些低维 Rh_n 团簇能稳定于晶界@表面载体上, 并且对 NO 表现出较强的捕获和分解能力。通过计算 NO 分解势垒, 我们发现 NO 在方形 Rh_4 团簇上解离为 N 和 O 原子仅需克服 0.075 eV 能垒, 这意味着 NO 可以在 527 K 温度下完全自发分解 (基于分子动力学 (MD) 模拟)。我们的工作表明, 对衬底结构的修饰和调控可以丰富 Rh 团簇催化剂的结构, 并有效改善它们的物理性质, 使其在其他氧化还原反应中发挥重要作用。

Z-118

The origin of the ion transport, charge transfer and energy exchange in the electrochemical interface

Guoping Gao

Xian Jiaotong University

The proton migration from the outer Helmholtz layer to the inner Helmholtz layer and then reduction on the Pt electrode are the two most fundamental electrochemical processes. It is wildly assumed that no charge transfer involved in the proton migration process. Using our new grand canonical fixed-potential calculation, we find that for the whole process, there are more electrons transferred in the proton migration part than in the final reduction part to keep the constant potential of the electrode. This fundamentally changes the energetics of the process, and influences the proton profile in the Helmholtz layer. Consequence, the local pH value is negatively proportional to the absolute potential, while inversely proportional to its distance from the electrode, which is corroborated by experimental results. Since this is such a fundamental textbook process in electrochemistry, the new insight provided by our calculation can certainly attract a lot of attention.

Z-119

稀土二氧化铈负载纳米颗粒催化材料的计算模拟与设计

龚学庆

上海交通大学

CeO_2 是一种重要的稀土金属氧化物, 常作为纳米催化材料的活性载体, 同时, 也因其丰富的结构特征被表面科学研究所关注。在最近的工作中, 我们重点研究了 $\text{CeO}_2(111)$ 表面负载不同尺寸 Rh_n 团簇体系的电子结构和催化活性。通过系统的密度泛函理论计算, 我们发现 CeO_2 载体可以起到电子储存器的作用来氧化负载物种, 对于原子数不同的小尺寸 Rh_n 团簇, 它们都被统一氧化到 +2 价态。进一步, 计算发现不同尺寸的 Rh_n 团簇在总价态不变的情况下, 平均每个 Rh 的正价态随尺寸增大而变弱, 从而使得较小尺寸的 Rh_n 团簇能够提供相对高价态的 Rh 原子位, 并在 CO_2 加氢还原反应中有效稳定氢负物种, 从而提高催化加氢活性和 CH_4 产物的选择性。

Z-120

基于第一性原理的固氮光催化剂和电催化剂的研究

许英

湖南科技大学

设计高效的单/双原子催化剂以在常温下将氮转化为氨具有重要的意义。发展绿色新能源技术合成氨不仅可以减少对化石能源的依赖, 还能降低因化石能源燃烧而引发的环境污染。开发高效的固氮光电催化剂是一个前景广阔但充满挑战的任务。深入理解氮固定过程对于未来高效催化剂的设计至关重要。基于密度泛函理论的第一性原理计算为理解催化机制和电催化过程提供了重要依据。在本研究中, 我们探讨了通过负载过渡金属原子的方式, 如二维过渡金属硫化物、有机金属框架 (MOF) 和共价有机框架 (COF)、二维硼碳化合物等, 进行光电催化剂的筛选与探索。设计了一系列具有良好催化活性的光电固氮催化剂。特别是通过双原子的协同作用, 显著降低了限制电位。此外, 探讨了过渡金属单原子催化剂的筛选策略、配位原子种类, 以及中心原子的磁矩的影响, 并对本征描述的建立进行了深入研究。我们的工作进一步能够

促进对二维界面作为固氮电催化剂设计的理解，为通过固氮开发先进的氨生成催化系统提供了新的思路。

Z-121

d-orbital-like localized p state in single-atomic catalysts

甘立勇

重庆大学

Z-122

氮化碳负载单原子催化剂的理性设计

张龙

中南大学物理学院

开发和利用新能源技术有利于缓解能源危机和解决环境问题。近年来金属空气电池和燃料电池等能源转化和存储器件，引起了广泛关注。电催化材料是这些新能源设备的核心组成部分 [1]。在催化剂表面涉及到几种典型的电化学氧化还原反应，如析氧反应（OER）和氧还原反应（ORR）[2]。但目前这些反应在催化材料表面的动力学过程较为缓慢，限制了该类电池的能源转化效率，因此亟待开发高性能的催化材料。本研究基于随机策略、空间群理论和图论结合第一原理计算，开发了一个计算框架。通过该框架，发现了 15 种新型碳氮化物(C_xN_y)材料，其中多种材料具备良好的导电性且具有特殊的氮化孔特性，因此适合构建单原子催化剂。随后，通过高通量计算，我们系统地研究了这些单原子催化剂的催化性能，揭示了它们的稳定性和活性趋势。通过催化剂评估，发现了一系列高性能的双功能 OER 和 ORR 单原子催化剂。此外，我们构建了单原子催化剂数据库并结合机器学习方法，确定了影响单原子催化剂稳定性和活性的关键因素。最后，通过机器学习后处理方法（SHAP 分析），进一步阐明了机器学习模型的输出特性，并理解了每个特征对模型预测的影响。基于这些分析，我们建立了催化性能和活性之间的关联，提出了高性能双功能电催化剂的设计策略。

References:

[1] Cui, X.; Ren, P.; Deng, D.; Deng, J.; Bao, X. Energy Environ. Sci. 2016, 9, 123-129.

[2] Bai, L.; Hsu, C.-S.; Alexander, D. T.; Chen, H. M.; Hu, X. Nat. Energy. 2021, 6, 1054-1066.

Z-123

突破线性标度关系助力电化学固氮合成氨

赫丙玲

巢湖学院

利用可再生能源电力将 N_2 还原合成 NH_3 (NRR)，为可持续 NH_3 生产开辟了一条极具潜力的新途径。然而，NRR 的中间体吸附能间存在的线性标度关系严重制约了反应效率。本工作结合密度泛函理论与计算氢电极模型，深入研究了负载在石墨二炔 (GDY) 表面的 V 与 3d 过渡金属 (V-TM@GDY) 双原子催化剂 (DACs) 在 NRR 中的催化性能。研究发现，NRR 中 NH_2 与 NH_3 的吸附能不再遵循线性标度关系，在所有异核 DACs 中， N_2 分子上的电荷转移量与 NH_3 合成限制电位 ($UL(NH_3)$) 之间存在火山形关系。进一步的研究发现，V-TM@GDY 通过“接受-捐赠”机制活化吸附的 N_2 分子。在 NRR 中，GDY 作为电荷储存库，V-TM 作为电荷传递体，且 V 与 TM 之间的协同效应使得 V-Cr@GDY 和 V-Fe@GDY 表现出高催化活性，其 $UL(NH_3)$ 值分别为 -0.36 V 和 -0.42 V。同时，这两种 DACs 均能有效抑制析氢副反应，实现了接近 100% 的理论法拉第效率。我们的研究指出了电荷转移在 NRR 过程中的关键作用，并突出了含 V 的异核 DACs 在 NRR 领域内展现出的巨大应用潜力，期望这一研究成果能够激发该领域更为深入的实验研究。

Z-124

二维碳氮材料理论设计及其电催化活性与选择性机理研究

谭锐、唐振坤*

衡阳师范学院

二维碳氮材料因其优异的物理化学稳定性、丰富的活性位点及高金属负载能力，逐渐成为单原子催化剂 (SACs) 的理想载体。然而，如何精准调控单原子与载体之间的键合与配位环境，以满足特定电催化反应对活性和选择性的严格要求，仍是当前电催化领域亟待解决的关键问题。基于此，我们理论设计了几种二维碳氮材料，包括 PH-CN，g- C_2N ，T- C_2N 和 C_7N_6 ，通过第一性原理计算和理论分析，系统研究了这些

二维碳氮材料的稳定性和电子结构。此外,探索了二维碳氮材料在氧还原反应(ORR)、氧析出反应(OER)和硝酸盐还原反应(NO_3RR)中的电催化性能,揭示了其催化活性起源和选择性机理。这些研究结果不仅丰富了二维碳氮材料体系,同时为高活性和高选择性电催化剂的设计提供了理论基础。

Z-125

阐明有机硅添加剂在锂离子电池中的产气抑制效应

王旌阳

Lawrence Berkeley National Laboratory

采用液态电解质的锂离子电池在高电压和温度下容易产生气体,从而降低电池性能并带来严重的安全风险。有机硅(OS)添加剂是解决锂电池产气问题的一种新兴候选解决方案,但对其作用机制仍然不详。我们提出了一项计算和实验相结合的研究(J. Wang et al., J. Am. Chem. Soc. **147**, 8841–8851 (2005)),首次阐明了OS添加剂的产气抑制效应。电池体积测量和气相色谱-质谱法表明,OS添加剂可以显著减少锂电池气体产出,对 CO_2 抑制效果尤其显著。通过密度泛函理论计算,我们确定了锂电池正极产生 CO_2 的多种可能路径,包括(1)亲核试剂诱导的碳酸亚乙酯(EC)开环反应和电化学氧化和(2)碳酸锂(Li_2CO_3)的直接电化学氧化。相应地,我们发现OS添加剂通过两种主要机制发挥作用:(1)清除亲核试剂,例如超氧化物($\text{O}_2^{\cdot-}$),过氧化物(O_2^{2-})和碳酸根离子(CO_3^{2-});(2)与碳酸亚乙酯氧离子和碳酸亚乙酯离子低聚。此外,我们发现OS添加剂具有强的锂配位亲和力,这有助于进一步降低亲核反应能,从而提高其亲核试剂清除效率。最后,我们对氟化OS化合物观察到的增强的气体还原效应提供了机理解释,并通过XPS表面分析结果加以验证。

Z-126

计算和数据驱动催化剂理性设计

肖建平

中国科学院大连化学物理研究所

在多相催化中,催化剂的微环境与活性位点同样重要。碳纳米管作为一种具有明确微环境的材料,其内部受限空间可以显著影响化学反应的催化活性。限域催化的理性设计必须依赖于对限域微环境的准确认识。然而,限域催化剂的结构复杂性和与微环境的相互作用阻碍了实验现象背后化学起源的破译。本工作中,我们发现碳管内的催化剂与反应物种的结合能普遍弱于外部,这种差异在不同温度、不同吸附物种和纳米颗粒尺寸下均存在。通过随机森林模型分析发现,管内团簇键长缩短是导致结合能减弱的主要因素,并在电子结构上使得d带中心下移。进一步,利用键长变化作为简化的描述符,通过微动力学模拟,解释了Fe和Ru在管内催化活性增强和抑制的现象。对于受限于反应物种重组或产物脱附的反应,限域效应可以促进活性;而对于受限于反应物吸附和解离的反应,限域效应则不利。上述发现为理性设计高效催化剂提供了新的思路。

Z-127

高熵合金催化材料的理论设计

陈志文

吉林大学

高熵合金(HEAs)凭借多主元协同效应、可调电子结构及动态稳定性优势,为破解传统催化材料活性位点单一与复杂反应适配性难题提供了新机遇。尽管HEAs的多元活性中心可精准调控多中间体吸附行为,但其超万亿级成分空间导致实验研究面临巨大挑战。本研究通过多尺度理论-实验融合策略,揭示HEAs表面吸附位点分布规律与催化反应动态机制。以FeCoNiCuPt模型体系为例,首次发现其表面氢吸附自由能(ΔGH^*)呈现近似高斯分布特性,该分布可作为析氢反应(HER)的普适性描述符:强吸附位点负责H吸附,弱吸附位点促进 H_2 脱附,二者通过表面氢扩散动态耦合。基于此提出“反常Sabatier原则”,即HER活性随强/弱吸附位点 ΔGH^* 极化程度增加而提升,并据此设计出FeCoNiCuPt HEA催化材料,其在 -10 mA/cm^2 电流密度下过电位低至 10.8 mV ,本征活性为商业Pt/C的5倍。进一步拓展至氧还原(ORR)与 CO_2 还原(CO_2RR)体系:通过高通量计算构建HEAs对OH吸附能数据库,结合配体-应力协同效应解析,开发出高精度的机器学习模型,精准预测贵金属HEAs的ORR活性趋势;针对非贵金属HEAs,发现其表面 $^*\text{COOH}$ 、 $^*\text{CO}$ 与 $^*\text{CHO}$ 等 CO_2RR 关键中间体的吸附能打破传统线性标度关系,根据机器学习的预测以

及分析, 我们设计出三种活性位点, 均展现了杰出的催化活性。该研究为 HEAs 催化材料的理性设计提供了从动态描述符创新到多反应普适性调控的理论框架。

Z-128

基于二维多铁材料单原子催化剂设计

张飞翔、王攀硕、史金磊、任晓燕*、李顺方

郑州大学

开发室温环境条件下的高效催化剂是物理、化学、材料等交叉学科中的重要科学问题和工业生产中全世界共同面临的重要挑战。近年来蓬勃发展的二维多铁性材料 (Two-dimensional multiferroics, 2D-MFs), 由于其“单相多性”(一个材料相同时拥有铁磁、铁电、铁弹性要素中的二者之上) 的独特物理性质和广阔的应用前景, 使其在物理、材料以及微电子器件等交叉领域倍受关注。然而, 2D-MFs 在催化方面的潜在应用和微观物理机制的相关研究尚属空白。因此, 在单原子尺度上深入研究多铁性材料的表面活性和催化性能不仅对理解多铁性材料在铁电、自旋、晶格、轨道等多角度耦合的物理机制具有重要的科学价值, 也对发展基于多铁性材料的新型室温高效催化剂提供了新的视角和平台。

本研究团队基于密度泛函理论的第一性原理计算研究方法, 以二维室温多铁性材料 $\text{Cr}(\text{h-fpyz})_2$ ($\text{h-fpyz}=\text{half-fluoropyrazine}$) (同时具有反铁电性和亚铁磁性) 为研究对象, 以自旋三重态的 O_2 激发和 CO 催化反应为例, 系统研究其催化性能和相关物理机制。研究发现, 二维多铁性材料 $\text{Cr}(\text{h-fpyz})_2$ 作为单原子催化剂能在室温下高效催化 CO 氧化反应。反应势垒仅为 0.325 eV , 室温下反应速率为 $3.47 \times 10^6\text{ s}^{-1}$, 相比其衍生物 $\text{Cr}(\text{pyz})_2$ 单铁性催化剂的反应速率增强 6 个数量级。对催化过程微观物理机制的深入研究表明, 二维多铁性材料 $\text{Cr}(\text{h-fpyz})_2$ 的室温高效催化性能归因于极化和自旋两个自由度的协同效应: 首先, 在 $\text{Cr}(\text{h-fpyz})_2$ 中, 半氟化吡嗪环 (h-fpyz) 转动对于催化反应具有显著的开关效应, 其灵活的配体旋转增强了活性位点 Cr 原子和吸附 O_2 分子之间的电荷转移和自旋耦合, 促进了自旋三重态的氧气分子向激发态的自旋单重态转变和活化。此外, 由于多铁性材料 $\text{Cr}(\text{h-fpyz})_2$ 中 Cr 单原子活性位点周围特殊的极化环境, O_2 分子吸附后诱导出比其在单铁性衍生物 $\text{Cr}(\text{pyz})_2$ 催化剂中显著降低的局域电场, 降低了 CO 极性分子与激发态的 O_2 分子反应时所受的静电排斥作用, 从而导致其在室温下具有高效催化性能。该工作表明二维多铁性材料在催化剂领域具有广阔的发展前景, 对于开发系列新型高效室温单原子尺度催化剂提供了新思路 and 重要理论指导。

Z-129

双原子催化剂的第一性原理设计与催化机理研究

马东伟

淮北师范大学

作为单原子催化剂尺寸上的扩展, 近年来双原子催化剂在能源转换与储存领域受到越来越多的关注。双原子催化剂的双原子活性位点和位点之间的协同相互作用, 对于催化复杂的多步反应或涉及共吸附多个中间体的反应具有独特的优势, 为优化催化活性和选择性提供了可行性。该报告简要介绍双原子催化的基本概念和发展历史, 然后结合课题组工作主要以电催化氮气还原、氧还原等反应为例来探讨双原子催化剂中的协同作用对催化活性和选择性的影响, 重点在于揭示异核双原子催化剂中的几何结构和电子结构(轨道、自旋、电荷等)协同作用增强其催化性能的机制。最后, 结合已有实验进展进一步展望双原子催化中亟待解决的若干关键科学问题。

文献:

- (1) J. Phys. Chem. C 2019, 123, 19066-19076
- (2) Phys. Chem. Chem. Phys. 2021, 23, 4018-4029
- (3) J. Energy Chem. 2021, 54, 501-509
- (4) J. Phys. D 2022, 55, 203001
- (5) J. Mater. Chem. A 2022, 10, 9707-9716
- (6) Phys. Rev. Appl. 2023, 19, 054094
- (7) Mater. Today Phys. 2023, 37, 101203
- (8) J. Mater. Chem. A 2024, 12, 4278-4289

(9) Nano Lett. 2024, 24, 8502-8509;

Z-130

曲率调控二维材料基催化剂的理论设计与催化性能优化

许梁

江西理工大学

曲率调控是优化二维材料基催化剂性能的关键因素之一。本研究聚焦曲率对二维材料基单原子催化剂性能的影响机制，结合第一性原理计算与机器学习算法，系统探究曲率对材料电子结构、物理性质及催化活性的影响机制。通过构建多尺度模型，揭示了曲率诱导的电荷再分布、能带调控及活性位点优化的物理化学过程，建立了普适性的“曲率-结构-性能”构效关系。进一步提出高效稳定的曲率调控催化剂设计策略，并构建了二维材料曲率效应物性数据库，为曲率材料在能源催化领域的应用提供理论支撑与设计范式。

Z-131

基于第一性原理计算的金属氧氮化合物表面析氧反应调控研究

兰珍云

合肥工业大学

金属氧氮化合物因其优异的可见光吸收性能和合适的能带位置，被认为是高效太阳能光解水的理想光电催化材料。然而，这类材料普遍存在析氧反应过电位较高的问题，限制了其实际应用效率。本研究基于第一性原理密度泛函理论计算，系统研究了应变调控、掺杂修饰以及铁电极化调控对 BaTaO_2N 和 InSnO_2N 表面析氧反应性能的影响。结果表明，在 BaTaO_2N 体系中，施加适当的单轴应变可显著降低 OER 理论过电位，最低可达 0.37 V，接近理论极限。对于新型铁电半导体 InSnO_2N ，研究发现极化方向的切换可有效调控反应中间体的吸附强度，突破 Sabatier 原理的限制，使理论过电位最低降至 0.20 V。更重要的是，在动态催化框架下，通过极化切换与应变调节的协同作用，过电位可进一步降低至 0.05 V，性能显著优于传统氧化物体系。本研究揭示了表面工程及铁电/应变协同策略在提升析氧反应催化性能方面的重要作用，为设计高效光催化分解水电极提供了理论依据。

Z-132

燃料电池电解质材料中质子引入机制及传导特性的第一性原理计算

令狐佳珺^{*1}、冯鹏²、马航³、马天星³、杨明⁴、李致朋²

1. 长安大学

2. 西北工业大学柔性电子研究院

3. 北京师范大学物理学院物理与天文学院

4. 香港理工大学应用物理系

固体氧化物燃料电池(solid oxide fuel cell, SOFC)可不经燃烧将含氢燃料中的化学能直接转换为电能，效率高且无污染，是利用氢能的重要途径。其核心组件电解质要求材料具备较高的离子电导率。新一代质子传导型电解质中，常见的 Ba 基钙钛矿材料需要在 ABO_3 的 B 位掺杂低价元素来提高质子浓度继而提升质子电导率，但低价元素又会作为负电中心阻碍质子的长程跃迁。本研究则利用第一性原理计算系统地探究了 A 位掺杂的作用。结果说明 A 位的低价离子掺杂能在不显著影响跃迁能垒的情况下大幅增加 BaHfO_3 中的质子浓度，是增强其质子传导性能的有效途径。而且，质子迁移过程包含两个环节：质子伴随配位氧的协同迁移与质子自迁移，A 位离子的半径与价态对这些迁移行为都有重要影响。另一方面，本研究还以 YbCoO_3 为例探究了过渡金属(transition metal, TM)氧化物材料作为燃料电池电解质的性能。结果说明 TM 元素可以借由未满的 3d 轨道对氢的引入进行电荷补偿，从而产生超过 1 H/f.u.的质子浓度，远高于普通 BaZrO_3 中 0.2H/f.u.的质子浓度。此外，计算结果还表明，质子在氧离子之间的跃迁，不论是在八面体内还是八面体间，都需要缩短两个氧离子之间的距离，而这种局部畸变的幅度和难度以及 TM-H 之间的排斥力是决定跃迁能垒大小的重要因素。本研究不仅为 BaHfO_3 和 YbCoO_3 材料做为质子固体氧化物燃料电池(H-SOFC)电解质奠定了理论基础，更加深了对钙钛矿材料质子引入机制和质子传导过程的理解，促进了对质子传导型电解质的开发和应用。

Z-133

固液界面调控及其对电催化反应影响的机制研究

李佳*

清华大学深圳国际研究生院

电催化反应是电能与化学能高效转化的重要桥梁，在碳中和与清洁能源利用领域具有重要战略意义。作为电催化反应的核心场所，固液界面的双电层结构及其动态演化对反应性能起着决定性作用。然而，由于界面环境的复杂性和原位表征手段的局限性，传统研究主要聚焦于催化剂本征性质的优化，而对溶剂化效应、离子调控等界面环境因素的微观机制缺乏深入理解。本报告将从溶剂化微环境、离子界面行为及量子效应等多维度介绍电催化界面的动态演变行为，阐明铜基催化剂反应选择性的微观机制，从原子尺度揭示了“催化剂-电解液”协同作用规律，并从理论上给出电催化体系的理性设计准则。

Z-134

二氧化碳电催化转化与碳矿化制备低碳胶凝材料

李能

武汉理工大学

Z-135

MBene 电子调控与溶剂化效应对 Li-CO₂电化学的协同作用机制彭琼*¹、孙志梅²

1. 贵州大学

2. 北京航空航天大学

二维过渡金属硼化物 MBene 因其丰富物化性质和类 MXene 层状结构，在 Li-CO₂ 电池中展现独特催化潜力。然而，现有研究主要关注 MBene 的电子特性对反应中间体吸附的影响，而其在电化学环境下与溶剂化效应的协同作用机制仍不清楚。本文拟结合 DFT 计算模拟、溶剂化模型和关键实验，探究 MBene 电子调控与溶剂化效应对 Li-CO₂ 电化学的协同影响。首先，通过多金属位点协同、异质结构筑及应变工程，调控 MBene 的 d 轨道电子填充、中间体吸附能，以及放电产物 Li₂C₂O₄/Li₂CO₃ 的形核与分解能垒，揭示电子调控对 CO₂ 还原/析出反应路径及催化活性的影响规律。其次，构建恒电势混合溶剂化模型，探讨溶剂分子取向、界面离子-偶极/氢键作用对 MBene 电荷分布、催化反应动力学与循环稳定性的影响，从而阐明电子调控与溶剂化效应的协同机制，为进一步发展 Li-CO₂ 电池催化剂-溶剂组合提供设计准则。

Z-136

聚焦活性位点密度：原子级催化剂活性影响机制的理论研究

吕鹏、马东伟、贾瑜、白莹*

河南大学

原子级催化剂的活性位点密度决定了催化剂的整体活性，对实际应用至关重要。高活性位点密度条件下，由于催化活性与本征电子自旋磁态以及电子结构等电子性质密切相关，活性原子之间的近邻相互作用将会通过调制电子性质而影响本征活性。该工作通过高通量第一性原理电子结构计算，从理论上探索了实验合成的 M₂N₆ 活性中心作为基本结构单元构建超高密度双原子催化剂 (DAC) 的可能性，并进一步研究了其在氧还原反应 (ORR) 中的催化性能和自旋磁态作为 DAC 描述符的可行性。主要发现如下：1、区别于传统的基于能量和轨道的活性描述符，该工作发现双原子催化剂活性中心金属原子的自旋磁矩可以作为一种新的催化描述符；2、高密度双原子催化剂 Co₂N₆ 与对应的实验上实现的低密度 Co₂N₆ 相比，前者表现出显著增强的 ORR 活性，这归因于平面晶体场诱导的自旋电子态交叉畸变。综上，该工作提出的自旋磁矩催化活性描述符将指导基于自旋电子态调控实现高效双原子催化剂的合理设计。

参考文献：

[1] P. Lv, W. Lv, D. Wu, G. Tang, X. Yan, Z. Lu*, and D. Ma*, Ultrahigh-Density Double-Atom Catalyst with Spin Moment as an Activity Descriptor for the Oxygen-Reduction Reaction, *Phys. Rev. Appl.* 19, 054094 (2023).

[2] W. Lv, J. Deng, D. Wu, B. He, G. Tang, D. Ma, Y. Jia, and P. Lv*, Similar electronic state effect enables excellent activity for nitrate-to-ammonia electroreduction on both high- and low-density double-atom catalysts, *J*

Chem. Phys. 159, 164704 (2023).

[3] X. Shi*, Y. Jiang, B. Zeng, Z. Sun, M. Yun, P. Lv*, Y. Jia, and X. Zheng*, In situ electrochemical production of solid peroxide from urine, Nat. Catal. 8, 67 (2025).

Z-137

基于相场方法的锂电池电极颗粒微结构设计及裂纹抑制研究

陆宇阳^{*1}、常力戈²、倪勇²

1. 北京理工大学

2. 中国科学技术大学

在锂离子电池快速充放电过程中，电极颗粒内部因锂离子嵌入/脱出产生显著应力，易诱发颗粒裂纹，导致容量衰减。对于由初级晶粒构成的二级电极颗粒而言，调控其微结构是提升结构完整性与容量保持率的有效策略。然而，颗粒内锂扩散、应力演化与裂纹扩展过程相互耦合，为微结构优化设计带来挑战。本文建立了耦合断裂相场理论与平滑界面方法的相场模型，系统研究了不同充放电速率条件下，二级颗粒中初级晶粒的取向与形貌对电极倍率性能及结构稳定性的影响。研究发现：在初级晶粒取向随机分布的二级颗粒中，随扩散各向异性增强，裂纹扩展程度加剧；反之，当初级晶粒取向均指向颗粒中心时，扩散各向异性增强则能抑制裂纹扩展。进一步模拟表明，初级晶粒呈径向排列的二级颗粒，其裂纹易沿径向穿越中心并延伸至表面；而表面包覆处理可有效缓解此类裂纹扩展。本研究揭示了二级颗粒微结构与其结构稳定性之间的内在关联，为高性能电极颗粒的微结构设计提供了重要理论依据与设计准则。

Z-138

铝掺杂在 Lu_2SiO_5 中的位点占据机制：离子半径与化学价态的关键作用

孙雪娇

中国科学院上海硅酸盐研究所和硕路 585 号

Z-139

免于界面退极化效应的光学声子软化新理论

骆军委

中国科学院半导体研究所

器件持续小型化提升芯片集成度的摩尔定律已经接近物理极限，主要瓶颈是晶体管功耗难以等比例降低。有两个主要途径可以降低晶体管功耗延续摩尔定律，其一就是寻找拥有比 HfO_2 更高介电常数和更大禁带宽度的新型高 k 氧化物介电材料，在不降低栅控能力的前提下拥有更厚的栅介电层，通过遏制量子隧穿效应引起的栅极漏电流从而降低功耗。另一个途径就是采用铁电/电介质栅堆叠的负电容晶体管（NCFET）突破传统 MOSFET 晶体管的室温 60 mV/dec 亚阈值摆幅限制，进而实现更低的工作电压和功耗。氧化物高 k 介电常数与铁电相变都源于光学声子软化，通常认为，其软化来自强 Born 有效电荷引起的长程库伦相互作用，这导致材料的介电常数与禁带宽度成反比，难以同时拥有高介电常数和更大禁带宽度。此外，铁电材料受限于界面退极化效应难以应用于纳米尺度的大规模集成器件。我们提出了通过拉伸原子键降低化学键强度实现光学声子软化的新理论，并提出该光学声子软化新理论可以解决传统铁电材料面临的强 Born 有效电荷引起的界面退极化效应。利用该理论成功地解释了困扰人们的硅上外延 HfO_2 和 ZrO_2 薄膜只有在厚度降低到 2-3nm 时才出现铁电性的“逆尺寸效应”。这一新理论为发展 CMOS 芯片的高 k 介电层、铁电晶体管、相变存储器、热电和多铁等与光学声子软化相关的新原理半导体器件提供了新思路。

Z-140

掺铒硅二极管反偏碰撞发光理论与光子增益

但亚平

上海交通大学

本研究通过反向偏置的 Er/O/B 共掺硅 PN 结二极管，实现了基于碰撞激发机制的高效光发射。传统硅基铒离子 (Er^{3+}) 激发依赖激子复合能量传递，效率受限，而本工作提出利用强电场加速电子与 Er^{3+} 的弹道碰撞，直接激发其 4f 能级，从而显著提升发光效率。实验表明，反向偏压下发光效率较正向偏压提高 2 个数量级，归因于电子在耗尽区的高能碰撞激发效应。理论模型进一步揭示，单个电子在穿越发光区域时可多次激发 Er^{3+} ，产生光子增益现象，增益值由发光区宽度 (L_{ex}) 与电子平均自由程 (l) 的比值决定 (G

= Lex/l), 为优化器件性能提供了理论依据。

Z-141

低维材料中激子绝缘体研究

王建峰

北京航空航天大学

Z-142

钙钛矿及其异质结界面电子性质研究

刘标

中南大学

有机无机杂化钙钛矿材料具有光吸收强和载流子迁移速率高、载流子扩散长度长、非辐射电荷复合低等优点,同时制备工艺简单、生产成本低,因此,过去几年钙钛矿材料作为太阳能电池领域中的明星材料,取得了突破性进展。钙钛矿异质结集合了钙钛矿材料和其他材料的优异特性,但钙钛矿异质结的界面微观机制及相关特性有待研究。本报告拟采用密度泛函理论,构建不同钙钛矿异质结构模型,深入研究该异质结界面成键特性,揭示界面稳定性机理,阐明该异质结能级、光学性质、电子传输性质。为提高钙钛矿光电性能提供重要理论指导。

Z-143

光电材料载流子动力学理论模拟研究

贺进禄

内蒙古大学

光电材料在清洁能源制备和环境污染治理领域具有潜在的应用前景。然而,其太阳能转换效率还远低于实际应用。如何提高能量转换的效率,成为光电材料的研究重点。光生电荷复合是导致光电材料能量转换效率低的关键因素,理解光生载流子弛豫的机理,对于提高太阳能转换效率具有重要意义。光生电荷弛豫过程是超快复杂过程,通过实验手段探究其机制还存在一定的挑战。我们通过非绝热分子动力学结合含时密度泛函理论方法,研究了多种实际因素对光生电荷复合过程的调控,为高效光电材料设计提供理论基础。

Z-144

I₃-V-VI₄ 族半导体太阳能电池的多尺度改性机制与理论设计

黄丹

广西大学物理科学与工程技术学院

与黄铜矿型 I-III-VI₂ 族半导体(例如 CuInSe₂)相似, I₃-V-VI₄ 族半导体同样可看作是由金刚石结构化合物衍生而来的一族半导体材料。该族半导体材料中包含一些带隙适宜、成本低廉或毒性较低的化合物,适宜作为太阳能电池的吸收层材料。然而,目前其研究热度及实验性能却远低于 I-III-VI₂ 族半导体。在本研究中,我们结合第一性原理计算与器件仿真模拟,探究了几种 I₃-V-VI₄ 族半导体的微观电子结构、缺陷属性,并开展了太阳能电池器件设计。研究结果认识了 I₃-V-VI₄ 族半导体的本征物理特性与缺陷演变规律,从原子尺度阐明了影响材料性能的微观制约因素,还为实验提供了具体的工艺参数与明确的器件结构优化方案。同时,本研究工作也表明将第一性原理计算与器件仿真模拟相结合能有效突破传统理论研究局限,拓展了太阳能电池理论研究的研究方法。

Z-145

氧化物极化子的描述符理论方法发展及应用

刘利民

北京航空航天大学

Polarons—quasiparticles formed by electron-lattice interactions—play a critical role in determining electrical, optical, and electrochemical properties. Their configurations, dynamic behaviors, and lifetimes remain incompletely understood, particularly in transition metal oxides and amorphous materials, where complex spatial distributions, coupling modes, and migration characteristics pose unresolved scientific challenges. In this talk, I will address the most recent work in our group.

Z-146

过渡金属氧(属)化物中的极化子特性的理论研究

殷文金

湖南科技大学

Z-147

有机锡氧化合物极紫外光刻胶材料的第一性原理计算研究

王涵

上海科技大学

随着半导体先进制程的不断推进,业界对高性能极紫外(EUV)光刻胶的需求迅速增长。然而,由于EUV光源亮度有限,要实现更小的线宽,提升光刻胶材料的光敏性至关重要。近年来,由于锡原子在EUV波段具有优异的吸收特性,一系列有机锡氧化合物,特别是 $\text{Sn}_{12}\text{-oxo}$ 团簇类光刻胶,在光刻性能方面展现出显著优势。为进一步理解其性能并加速材料的设计与筛选,我们采用第一性原理计算方法对这类材料进行了系统研究。本研究选取 Sn_{10} 、 Sn_{12} 、 Sn_{14} 等不同尺寸的有机锡氧化合物团簇为对象,考察了团簇分子中Sn原子与有机配体之间的键能、团簇垂直电离势、HOMO-LUMO能隙等电子结构性质,并发现这些性质与材料的光刻性能密切相关。当前对 $\text{Sn}_{12}\text{-oxo}$ 团簇的改性主要集中于抗衡阴离子替换策略,对有机配体的修饰研究尚显不足。针对这一问题,我们利用量子化学计算系统地预测了多种有机配体对 $\text{Sn}_{12}\text{-oxo}$ 团簇光敏性的影响,并在此过程中进一步提炼出关键结构描述符。在筛选方面,我们基于上述描述符对数据库中的有机锡氧化合物进行高通量计算,以快速识别具有潜在高灵敏度的团簇材料。本研究不仅建立了有机锡氧化合物EUV光刻胶材料与其关键电子结构性质之间的关联,还提出了系统高效的设计与筛选策略,为新型EUV光刻胶的分子结构设计和性能优化提供了理论指导。

Z-148

金属氧化物表界面结构及其演化规律的理论模拟

韩仲康

浙江大学

金属氧化物表界面的原子结构与其在反应条件下的动态演化对其催化性能具有决定性影响。本文基于 CeO_2 作为模型体系,系统开展了金属氧化物表界面结构演化的理论模拟与原位表征研究。通过结合球差校正扫描透射电镜(STEM)与第一性原理计算、压缩感知辅助集群展开方法、粒子群优化算法等先进理论模拟手段,我们揭示了多种 CeO_2 晶面在高温和不同气氛下的重构机制与结构稳定性。研究发现, $\text{CeO}_2(110)$ 表面在高温下形成周期性一维亚表面氧空位通道,增强了质子导通性; $\text{CeO}_2(100)$ 面则经历从金属Pd前氧化扩散到直接分散的温度驱动演化过程,且展现出显著的界面依赖性;同时,发现不同表面晶向与氧化物之间的外延匹配关系可显著调控纳米颗粒的氧化动力学路径。进一步通过理论与实验联合识别出 $\text{CeO}_2(100)\text{-(}4\times 6\text{)}$ 表面重构结构,明确其由 $\text{Ce}(4f)\text{-O}(2p)$ 轨道混合与极性补偿驱动。这些发现不仅加深了对氧空位与界面相互作用的理解,也为多尺度调控金属氧化物催化界面结构与性能提供了理论基础和设计策略。

Z-149

提高铅基氧化物高介电常数的设计规则

贺绮雯、童文旖、段纯刚*

华东师范大学

作为具有高介电常数(高 κ)的 SiO_2 替代材料,铅基氧化物在集成电路、介电传感器与光电子器件等领域展现出广阔应用前景。然而,其实际应用仍面临两大核心挑战,即稳定具有高 κ 的四方相(T相)结构并进一步提高介电常数。本研究基于第一性原理计算揭示了T相 HfO_2 的高 κ 特性与特定声子振动频率(ω_q)的软化效应存在显著关联,并发现该频率可通过Hf-O键长与原子质量进行调控。键长增加通过弱化原子间相互作用实现 ω_q 软化;而质量重的原子因较难振动同样可降低 ω_q 。具体来说,体积膨胀与面内双轴应变可以通过键长调控来有效增强T相 HfO_2 介电常数。这一结构效应也为实验观测到的 HfO_2 畴壁异常高 κ 现象提供了可能的理论解释。此外,针对T相稳定性难题,我们指出电负性小的原子能增强结构内的离子相互作用,从而有利于高配位T相的稳定。基于这些结果,我们提出了一个普遍的规律,即掺杂具有尺寸

大、质量重和电负性小的原子是同时提升高 κ 和稳定 T 相的有效方法。在上述规律的指导下，我们提出了有前景的 Ce 掺杂策略，并得到了一些实验结果的支持。我们的工作阐明了铅基氧化物中高 κ 行为的声子频率软化机制。我们提出的一般规则不仅为解决上述两个关键问题提供了可行的 Ce 掺杂策略，还为纳米电子器件介电材料设计开辟了新范式。

Z-150

机器学习辅助的芯带价带发光氧化物材料设计

刘冠绮、姜晓琳、胡振芃*

南开大学

闪烁材料具有将高能射线转化为可见光的能力，因此在安全检查、医学成像和高能物理实验等领域得到了广泛应用。在医学成像领域，尤其是在正电子发射断层扫描（PET）中，目前仍缺乏适用的闪烁材料，因此超快闪烁材料已经成为闪烁材料领域的研究热点，其中交叉发光（CVL）闪烁材料受到了广泛关注。然而，当前 CVL 材料主要以卤化物为主，其易潮解且环境稳定性较差，限制了其应用范围和效果。为了突破这一关键问题，我们结合第一性原理计算和机器学习方法，探究了 CVL 现象的构效关系，成功预测了一种新型 CVL 氧化物。

本研究以芯带带隙（ E_{vc-g} ）作为研究对象，通过第一性原理计算对现有 CVL 材料进行了全面的数据积累和电子结构分析。基于理论分析结果，选择了不同的特征组合，研究其对 E_{vc-g} 的影响，并从中筛选出最优组合构建了 E_{vc-g} 的梯度提升决策树（XGBoost）模型。随后，利用 RG^2 调控相关参数，搜索得到一批 CVL 氧化物候选材料，最终从理论上筛选出了一种具有 CVL 现象和较高稳定性的 CVL 氧化物。

这一成果不仅为 CVL 材料的设计提供了新的思路，也为开发稳定且新颖的 CVL 材料开辟了一条全新的道路，有望推动超快闪烁材料在实际应用中的进一步发展。

Z-151

Bi₂O₂Se 载流子迁移率的第一性原理计算

袁誉博、李文彬*

西湖大学

Bi₂O₂Se 是一种层状半导体材料，具有优异的载流子迁移率和空气稳定性，因此在新一代电子和光电子器件中展现出广阔的应用前景。尽管已有实验研究探索了该材料在不同掺杂浓度下的载流子输运行为，包括 *n* 型和 *p* 型导电性，但尚未能完全理解其背后的输运机制。在本研究中，我们基于第一性原理计算的玻尔兹曼输运方程并引入电四极修正，对 Bi₂O₂Se 中的载流子迁移率进行了研究。在低温下，*n* 型掺杂条件下的电子迁移率随着掺杂浓度的增加而下降，这是由于电离杂质散射所致。在较高温度下，载流子迁移率主要受到极化光学声子的 Fröhlich 相互作用的限制。Bi₂O₂Se 具有较高的本征面内电子和空穴迁移率，这为构建平面型的本征 *p-n* 同质结提供了可行性。考虑到霍尔效应，我们预测了 Bi₂O₂Se 在室温时的面内电子霍尔迁移率达到 $517 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ，与实验测量结果接近。这些结果为理解 Bi₂O₂Se 中受电离杂质散射和电声子相互作用影响的载流子输运机制提供了重要的理论依据，并为未来的理论与实验研究提供了有价值的理论数值作为参考。

Z-152

半导体器件中缺陷和杂质的第一性原理计算模拟研究

陈时友

复旦大学

有限温度的平衡态下，半导体晶格中不可避免的会存在缺陷和杂质，对半导体的物性产生影响，因此，缺陷和杂质物理的研究是半导体物理研究的重要组成部分，也是微电子和光电子等器件设计和优化的基础。本报告将介绍半导体中缺陷和杂质的第一性原理计算模拟方法、机器学习加速方法和软件，包括半导体的热力学稳定性和元素化学势、缺陷和杂质的形成能、离化能级和浓度、载流子浓度及费米能级，缺陷和杂质诱导的光致发光谱、载流子辐射和非辐射复合速率及少子寿命、离子注入掺杂工艺模拟和辐照损伤机制等方面，并讨论缺陷俘获载流子过程中声子的重整化效应，带边直接跃迁、多能级缺陷诱导间接跃迁和 Auger 跃迁共同贡献的载流子复合速率模型。基于这些缺陷和杂质性质的计算模拟，我们可以开展半导体器件从原子级到连续介质级的跨尺度 TCAD 仿真，研究缺陷和杂质对光电子器件的效率、微电子器件的电

学特性、偏压温度不稳定性 and 随机电报噪声等可靠性问题的影响机制，进而开展高性能器件设计。

Z-153

后摩尔时代半导体缺陷与器件物理

邓惠雄

中国科学院半导体研究所

Z-154

α -SiO₂ 中氧空位的缺陷基态与电荷跃迁：载流子复合、TID 和 BTI 效应的微观起源

宋宇*¹、邱晨²、魏苏淮²

1. 中国科学院新疆理化技术研究所

2. 宁波东方理工大学

非晶二氧化硅 (α -SiO₂) 是现代信息技术中使用最多的介电材料，其中辐照和应力诱生的正电氧空位缺陷 (E' 中心) 是 MOS 器件电离总剂量 (TID) 效应和偏置温度不稳定性 (BTI) 的根源。但以往采用 PBE 和 PBE0 泛函的第一性原理计算获得的缺陷基态与 EPR 实验不符 [1]，因此其电荷跃迁能级存疑，制约了对 TID 和 BTI 效应的正确理解。本报告中，我们采用自旋极化的 HSE06 杂化泛函计算 α -SiO₂ 中大样本氧空位的电子性质，获得与 EPR 实验相符的缺陷基态 [2]。进一步，我们获得 dimer 和 puckered 构型氧空位的电荷跃迁能级，成功解释宽禁带材料中反常的载流子复合 [3]。这些电荷跃迁能级比以前的结果高得多，处于硅窗口 [4]，因此，可能支持曾经提出但被舍弃的 BTI“四态模型”。我们还采用全声子谱的电-声耦合常数计算，获得与载流子注入实验相符的载流子俘获截面，进而提出 TID 效应的“非辐射载流子俘获-结构弛豫”机制 [2]。我们展示，该机制可以替代延用 40 余年的传统“空穴输运-捕获”模型 [5], [6]，自洽解释并预测缺陷动力学的温度和电场依赖性。

参考文献：

[1] C. Wilhelmer, D. Waldhoer, M. Jech, A. M. B. El-Sayed, L. Cvitkovich, M. Walzl, and T. Grassler, Ab initio investigations in amorphous silicon dioxide: Proposing a multi-state defect model for electron and hole capture, *Microelectronics Reliability* **139**, 114801 (2022).

[2] Y. Song, C. Qiu, and S.-H. Wei, Hole Capture-Structural Relaxation Mechanism of Defect Generation in Ionizing-irradiated α -SiO₂, ArXiv 2410.11475 (2024).

[3] C. Qiu, Y. Song, H.-X. Deng, and S.-H. Wei, Dual-Level Enhanced Nonradiative Carrier Recombination in Wide-Gap Semiconductors: The Case of Oxygen Vacancy in SiO₂, *J Am Chem Soc* **145**, 24952 (2023).

[4] X. Guo, M. Huang, and S. Chen, Si/SiO₂ MOSFET Reliability Physics: From Four-State Model to All-State Model, ArXiv Preprint ArXiv: 1 (2024).

[5] T. R. Oldham and F. B. McLean, Total Ionizing Dose Effects in MOS Oxides and Devices, *IEEE Trans Nucl Sci* **50**, 483 (2003).

[6] J. R. Schwank, M. R. Shaneyfelt, D. M. Fleetwood, J. A. Felix, P. E. Dodd, P. Paillet, and V. Ferlet-Cavrois, Radiation effects in MOS oxides, *IEEE Trans Nucl Sci* **55**, 1833 (2008).

Z-155

二氧化钛表面的电子结构及缺陷识别

闻波

河南大学

作为经典光电催化材料，n 型半导体二氧化钛 (TiO₂) 一直备受研究人员关注。近年来发现，不同缺陷类型均可以在 TiO₂ 禁带当中引入多余电子导致的 Ti³⁺ 能隙态。除了电子结构上的影响，该能隙态对其光吸收、表面吸附异常敏感。我们通过 DFT 和实验结合的方法分别研究了 α -TiO₂(101) 表面和 r -TiO₂(011) 表面的电子结构，结果发现 TiO₂ 不同表面的电子结构存在明显的差异，且表面晶体场和体相晶体场的差异导致了深浅不一的能隙态。上述结果对理解 TiO₂ 不同催化活性和缺陷能级的识别提供了帮助，同时也为研究其他类似金属氧化物的电子结构提供了新的手段。

Z-156

缺陷影响载流子动力学行为的理论研究

童传佳

中南大学

缺陷是调控光伏器件载流子动力学行为的关键因素。本研究采用从头算非绝热分子动力学 (NAMD) 和含时密度泛函理论 (TDDFT) 系统研究了不同材料体系中缺陷对载流子动力学的影响机制。在有机-无机杂化卤化物钙钛矿中, 空穴注入与离子迁移和载流子复合存在"三体"协同效应。空穴注入减小离子迁移势垒、缩短迁移距离, 同时通过增强低频电子-振动相互作用和延长量子相干时间促进非辐射复合。这一效应源于钙钛矿的软晶格特性及价带最大值对空穴注入的敏感响应。在 $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 界面中, 碘空位 (VI) 和氧空位 (VO) 虽然单独存在时为良性缺陷, 但同时出现时产生有害协同效应。VO 促进 VI 向界面扩散并加速离子迁移, 降低界面稳定性。更重要的是, 缺陷组合引入深能级缺陷作为非辐射复合中心, 使载流子复合速率加快近 1 个数量级, 并通过激活高频声子模式进一步缩短载流子寿命。相比之下, $\text{SnO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 界面展现出独特的缺陷自钝化机制。活性双配位碘空位 (VI_{act}) 易于形成但不引入深能级缺陷, 反而钝化 Sn 悬挂键产生的带隙态, 降低过大的导带偏移, 抑制电子-振动相互作用。此自钝化效应使载流子寿命延长 30%, 电子注入速率提高 30%。研究揭示了缺陷对载流子动力学的双重影响: 既可通过协同效应加速复合和离子迁移, 也可通过自钝化机制优化界面电子结构。这些发现为钙钛矿太阳能电池中缺陷的微观动力学机制提供重要见解, 为缺陷工程优化器件性能提供理论指导。

参考文献:

- [1] Chuan-Jia Tong, Oleg Prezhdo*, Li-Min Liu*, et al., J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 6604.
- [2] Chuan-Jia Tong, Oleg Prezhdo*, Li-Min Liu*, et al., J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 3060.
- [3] An-Yu Zhu, Rui-Xue Ding, Chuan-Jia Tong*, et al., ACS Energy Lett. 2024, 9, 497.
- [4] Kai-Ping Wang, Chuan-Jia Tong*, et al., ACS Energy Lett. 2024, 9, 5888.
- [5] Kai-Ping Wang, Chuan-Jia Tong*, et al., ACS Energy Lett. 2025, 10, 1466.

Z-157

Multidimensional Defect Identification of Semiconductors in Nonequilibrium

Jun Liu^{1,2}, Yang Gao^{1,2}, Xiaolan Yan³, Yonggang Li^{*1,2}, Chuanguo Zhang¹, Linyue Liu⁴, Bing Huang^{3,5}, Zhi Zeng^{1,2}

1. Institute of Solid State Physics, HFIPS, Chinese Academy of Sciences

2. University of Science and Technology of China

3. Beijing Computational Science Research Center

4. Northwest Institute of Nuclear Technology

5. Beijing Normal University

While the static theory for understanding defect properties in semiconductors in equilibrium has been established for decades, it fails to identify the crucial defects in nonequilibrium, e.g., under irradiation. Here, we have developed a robust ab initio-driving multiscale modelling framework to identify deep-level defects in irradiated semiconductors with multidimensional defect properties. It overcomes two big challenges unsolved in the past studies, i.e., unambiguous nonequilibrium defect identification and exact deep-level transient spectroscopy (DLTS) simulation. Our method, verified by identifying the well-known deep-level defects in neutron-irradiated Si, has been successfully applied to identify the controversial deep-levels in neutron-irradiated 4H-SiC, solving the half-century mystery of their atomic origin. Furthermore, we discover that defect origins of the same DLTS peaks vary significantly with annealing temperature, due to different defect types with distinct dynamic behaviors, breaking the long-lasting belief from the static defect theory. Our study not only establishes the new understanding of nonequilibrium defect physics in semiconductors, but also lays a solid foundation for controlling targeted crucial defects to improve material properties and device performances.

Z-158

钙钛矿及其衍生光电半导体的缺陷与载流子特性研究

蔡增华

苏州科技大学

钙钛矿及其衍生材料在光电与能源领域展现出重要潜力。针对钛酸锶 (SrTiO_3 , STO), 本研究通过第一性原理计算揭示了其氧分压依赖的导电机制: 在缺氧条件下, 氧空位 (V_O) 作为主要施主缺陷主导 n 型导电; 随着氧分压升高, 锶空位 (V_Sr) 和钛替代锶 (Ti_Sr) 分别作为受主和施主缺陷调控载流子类型, 使得导电性从金属性向 n 型再向 p 型转变。研究还发现钛空位 (V_Ti) 因氧三聚体形成呈现反常施主行为, 为 STO 的缺陷工程提供了新见解。

在钙钛矿衍生半导体材料方面, 无铅钙钛矿衍生材料 $\text{Cu}_2\text{AgBiI}_6$ 因其较好的稳定性与光电特性成为光伏候选材料。非绝热分子动力学模拟表明, 其非平衡载流子寿命 (0.1 ms 至 0.1 ns) 受多种复合机制影响: 标准光照下, 带间非辐射/辐射复合及缺陷辅助复合 (Shockley-Read-Hall) 起主导作用; 而高激发条件下俄歇复合成为主导复合机理。该发现为优化 $\text{Cu}_2\text{AgBiI}_6$ 基太阳能电池效率提供了理论依据。

两项研究共同揭示了缺陷与载流子动力学理论模拟研究在钙钛矿及其衍生材料性能调控中的关键作用。

Z-159

半导体中的复杂缺陷: 结构和动力学演化

黄兵

北京计算科学研究中心

尽管用于理解平衡态半导体缺陷性质的静态理论已建立数十年, 但其无法识别非平衡态 (例如辐照条件下) 的关键缺陷。在此, 我们建立了一个第一性原理驱动多尺度计算框架, 用于识别辐照半导体中具有多维缺陷特性的深能级缺陷。该框架克服了过去研究中未解决的两个挑战: 非平衡态缺陷识别和精确的深能级瞬态谱 DLTS 模拟。该方法通过识别中子辐照硅中的深能级缺陷得到了有效验证。随后, 我们的方法成功应用于识别中子辐照宽禁带半导体 4H-SiC 中存在争议的深能级, 解决了其原子起源的谜题。更重要的是, 我们发现相同 DLTS 峰的缺陷起源随退火温度发生显著变化, 这是由于具有不同动力学行为的缺陷类型所致。我们的研究不仅建立了对半导体非平衡态缺陷物理的新理解, 也为通过控制目标关键缺陷来改善材料性能和器件性能奠定了坚实基础。

Z-160

高应变梯度诱导的半导体薄膜强极性

张东波¹、王雅巽¹、李建高¹、Gotthard Seifert²、常凯^{*3}

1. 北京师范大学 物理与天文学院, 教育部多尺度自旋物理重点实验室

2. Theoretische Chemie, Technische Universität Dresden, Dresden D-01062, Germany

3. 浙江大学量子物质中心, 浙江大学物理学院

一般认为, 半导体中应变梯度诱导的电极化 (即挠曲电效应) 相对较弱。但是最近的实验表明, 通过高应变梯度, 可以在常规半导体中获得强电极性。我们对半导体在高应变梯度下的挠曲电效应进行了系统研究。基于广义布洛赫定理的紧束缚计算发现, 在弯曲的硅 (Si) 和锗 (Ge) 薄膜中, 由于高应变梯度诱导带隙闭合, 材料出现了强类挠曲电效应。结合第一性原理能带计算的分析表明, 在弯曲薄膜的压缩侧和拉伸侧之间形成了 II 型能带排列。因此, 在带隙闭合后, 为达到热力学平衡, 电子会从压缩侧转移到拉伸侧, 导致沿薄膜厚度方向的极化发生显著变化。所获得的横向挠曲电系数异常高, 且与薄膜厚度的平方呈依赖关系。这种新机制可扩展到其他具有中等能隙的半导体材料。

Z-161

半导体输运性质高效计算与设计

邓天琪

浙江大学杭州国际科创中心

浙江大学材料科学与工程学院, 硅及先进半导体材料全国重点实验室

半导体材料的电、热输运性质, 如迁移率、热导率、热电效应等, 决定了相关器件的工作效率与能耗。

厘清电子与声子的散射与输运过程，高效、准确计算其中起决定性作用的电子-声子-缺陷耦合，对于设计半导体材料、优化输运性质、提高器件效能具有重要意义。为深化对半导体中电、热输运行为的理解，我们基于密度泛函理论计算、玻尔兹曼输运方程与机器学习分子动力学计算，发展了电子、声子散射与输运性质的高效计算模拟工具。基于理论计算，澄清了电子和声子与缺陷等微观结构的耦合在输运性质中的影响机制，并提出了基于组分与微观结构设计的半导体材料输运性质调控与设计准则。

Z-162

三维/二维卤化物钙钛矿的有机阳离子效应

南广军

浙江师范大学

三维卤化物钙钛矿具有可调节带隙、高光电转换效率、强的光致发光和长的载流子寿命等优点，被应用于光伏、发光二极管、光电探测器等领域。相比于三维钙钛矿，二维钙钛矿具有更高的稳定性，但其量子阱结构导致很强的量子限域效应，使得光激发产生的激子具有较大的结合能，不利于激子解离。然而，实验和理论研究表明有机阳离子对二维钙钛矿的电子态具有显著影响，但物理机制仍缺乏深入的研究。

本报告将首先简要介绍课题组对三维卤化物钙钛矿有机阳离子效应的理解[1,2,3,4]，然后详细汇报有机阳离子调控激子沿着强量子限制方向发生解离的物理机制[5]，理论预测有机阳离子诱导形成四极激子[6]，二维钙钛矿无机晶格硬度与激子极化子形成以及激子解离的关联[7]，并深入讨论物理起源，建立能带调控与激子态的关联[8]，为设计二维卤化物钙钛矿太阳能材料和发光材料提供理论指导。

参考文献:

[1] G. Nan, X. Zhang, M. Abdi-Jalebi, Z. Andaji-Garmaroudi, S. D. Stranks, G. Lu, D. Beljonne, *Advanced Energy Materials*, 2018, 8, 1702753.

[2] G. Nan, D. Beljonne, X. Zhang, C. Quarti, *The Journals of Physical Chemistry Letters*, 2020, 11, 2983-2991.

[3] Q. Feng, G. Nan, *The Journals of Physical Chemistry Letters*, 2022, 13, 4831-4839.

[4] Q. Feng, G. Nan, *The Journals of Physical Chemistry C*, 2023, 127, 16304-16311.

[5] X. Tan, Q. Feng, G. Nan, *Materials Horizons*, 2024, 11, 2248-2257.

[6] Q. Feng, X. Zhang, G. Nan, *Materials Horizons*, 2025, DOI: 10.1039/D5MH00166H.

[7] H. Zhou, Q. Feng, C. Sun, Y. Li, W. Tao, W. Tang, L. Li, E. Shi, G. Nan, H. Zhu, *Nature Communications*, 2024, 15, 8541.

[8] H. Cao, Q. Feng, G. Nan, *Chemical Communications*, 2025, DOI: 10.1039/d5cc01351h.

Z-163

TiO₂ 中极化子迁移的非绝热动力学研究

徐忠菲

华北电力大学

Z-164

团簇光激发性质的理论研究

杨小伟

内蒙古师范大学

团簇是介于微观原子、分子与宏观凝聚态之间的物质结构新层次，具有确定的原子数量和精确可控的几何与电子结构。团簇的光学性质由其结构特征和量子尺寸效应共同决定，在光电器件和量子信息领域具有重要应用前景。本次报告聚焦于富勒烯笼型团簇组装多聚体和过渡金属内嵌 IV 族笼型团簇的光学性质以及光激发特性的理论研究。基于含时密度泛函理论（TDDFT），在团簇组装体系中，以富勒烯组装多聚体结构为例，通过量子限域效应和团簇间界面耦合效应精准调控其激子特性，并诱导出较强荧光发射，在外电场下富勒烯多聚体的吸收光谱展现出较大的量子限域斯塔克位移。单团簇体系中，系统探索了 64 种过渡金属内嵌 IV 族笼型团簇的稳定性、发射波长及单重态-三重态能隙，阐明了其光物理性质的关键物理因素，首次揭示了过渡金属内嵌 IV 族笼型团簇的发光特性，为设计原子级精准的光学与光电器件纳米团簇提供了理论依据。上述理论结果为调控团簇以及团簇组装结构中的电荷以及激子行为提供了新视角，有

望推动其在发光器件、电光调制及量子信息等领域的应用。

Z-165

纳米团簇的激发态动力学与光电性能的调控机制研究

于雪克¹, 苏艳², 赵纪军^{3,4}

¹扬州大学物理科学与技术学院, 江苏扬州, 225009

²大连理工大学物理学院, 辽宁大连, 116024

³华南师范大学物理学院, 广东广州, 510631

E-mail: yuxk@yzu.edu.cn; su.yan@dlut.edu.cn

由于量子限域效应, 原子精确的纳米团簇表现出独特的光学和电子特性, 使它们在光电和能源应用中具有前景。结合含时密度泛函理论 (TDDFT) 与非绝热分子动力学 (NAMD) 方法, 我们系统探讨了内核组成、构型、配体及环境对光生载流子动力学的影响。研究内容包括: 在巯基保护的合金纳米团簇 $\text{MAu}_{24}(\text{SR})_{18}$ ($M = \text{Pd}, \text{Pt}, \text{Cd}, \text{Hg}$) 中, 不同金属掺杂通过调控 HOMO-LUMO 能隙与 MAu_{12} 核心振动协同作用, 显著改变载流子寿命, 其中 Cd/Hg 掺杂体系寿命较 Pd/Pt 提高约 100 倍, 揭示了能隙、电子-振动耦合及退相干时间的协同调控机制; 在 hcp-Au_{30} 、 $\text{fcc-Au}_{36}/\text{Au}_{44}$ 和 bcc-Au_{38} 等不同堆垛方式的纳米团簇中, 载流子复合动力学主要受低频 ($<200 \text{ cm}^{-1}$) 呼吸模式调控, 且该振动特征可作为团簇结构的指纹识别; 研究了配体替换对 $\text{Re}_{12}\text{S}_{16}\text{Cl}_4$ 基纳米团簇的电子结构与载流子动力学影响, 发现用 CO 配体取代 PMe_3 配体增强了光吸收性能、将偶极矩从 0.96 提高到 7.15 Debye, 抑制了载流子复合, 且产生的内建电场提高了电压阈值。这些发现建立了将几何/电子结构与激发态动力学联系起来的结构-性质关系, 为基于纳米团簇的光电器件提供了设计原则。

参考文献:

[1] Xueke Yu, Yan Su*, Jijun Zhao, *et al. Nanoscale Horiz.*, **7**, 1192, 2022.

[2] Xueke Yu, Yan Su*, Jijun Zhao*, *et al. Inorg. Chem.*, **62**, 20450, 2023.

[3] Xueke Yu, Wei Pei, Yan Su*, Jijun Zhao, *et al. Inorg. Chem.*, **64**, 1561, 2025.

Z-166

非化学计量类赫斯勒化合物的电子结构与序构设计

阮毓荣、冯涛、刘玮书、张文清*

南方科技大学

非化学计量类赫斯勒化合物突破了传统赫斯勒化合物中严格的化学计量限制, 展现出更为复杂和灵活的晶体结构和电子性质, 从而赋予这类材料丰富的物理特性和广泛的潜在应用价值。首先, 我们揭示了非化学计量类赫斯勒化合物中额外间隙 Ni-d 轨道对电子结构的影响和电输运性质的显著调控作用, 这些发现为理解和设计高性能 Ni 基非化学计量类赫斯勒热电材料提供了重要理论依据。进一步, 我们提出了非化学计量类赫斯勒化合物的设计策略, 揭示了对称性约束的 d 轨道及其相互作用对体系能量稳定性的决定性作用。通过化学键分析推导出相应的成分关系, 预测了大量种潜在的新体系, 并通过高通量计算验证了设计策略的普适性。这些发现不仅丰富了非化学计量类赫斯勒化合物化合物的物态多样性, 还为新型功能材料的设计与开发提供了重要理论依据和实验指导。

Z-167

金属衬底上单元素二维材料原子结构研究

徐虎

南方科技大学

本报告围绕金属衬底上单元素二维材料的构筑与表面结构调控展开系统研究。首先, 探讨单一无机元素与金属衬底之间的相互作用, 建立基于吸附特性的生长行为分类标准。通过分析成核阶段的能垒与原子扩散路径, 揭示主导成核行为的关键因素与机制。进一步, 从原子结构演化规律出发, 总结表面构型的形成机制, 并提出基于表界面调控的二维材料设计策略。此外, 系统评估机器学习力场在成核动力学预测、复杂表面结构模拟以及多尺度表界面材料设计中的应用潜力, 展示其在提升模拟效率与精度方面的独特优势。

Z-168

硅基纳微结构与器件的高性能多尺度模拟

侯超峰

中国科学院过程工程研究所

原子模拟方法是研究纳微结构材料和器件热力学性质和行为的有力工具。然而模拟中复杂的原子间多体作用势计算量大，原子数目多，致使计算的纳微结构和器件尺寸受到极大限制。基于多台全球领先超算系统强大的硬件计算能力，开发的高性能原子模拟算法取得了优异的大规模并行计算性能，相比国际同类开源软件提升显著。对于一维纳米线和二维纳米薄膜的模拟，特征尺寸达到了实验制备与测量的范围，传热方向尺寸超过毫米，在克服了非平衡原子模拟方法尺度效应的基础上探究了纳微结构热导率和声子传递随特征尺寸的变化。对于大规模物理电路的模拟，集成了表面、掺杂、沟道、介电层、栅极和版图等纳微尺度因素影响，实现了不同工艺器件电路的导热计算。模拟算法支持千万计算核心以上的并行，支持数十万纳米晶体管和万亿以上原子的模拟。此外，针对纳微结构和晶体管器件的介观声子玻尔兹曼传递方程的高效格子方法求解，提出了声子弛豫时间的校正模型，导热计算精度较文献报道显著提升。

Z-169

低维量子系统中的自旋轨道耦合调控以及能谷物性

付吉永

曲阜师范大学

自旋轨道耦合不但使自旋的电调控成为现实，更是主导当前凝聚态物理诸多新概念和新现象的根源，如拓扑绝缘体、马约拉纳费米子以及我们提出的持续斯格明子晶格与可拉伸持续自旋螺旋等。本报告主要围绕低维量子系统中的多带自旋轨道耦合，汇报我们最近的一些工作进展，包括多带自旋轨道耦合的全局调控和电光联合调控，自旋螺旋的拉伸与手性补偿，电荷带间转移辅助的自旋调控，纤锌矿异质结构中 Rashba 和 Dresselhaus 自旋轨道耦合的对称性以及适用于量子阱、量子线以及量子点的普适自旋轨道耦合哈密顿量等。最后，拟亦报告我们最近在新型二维材料（如过渡金属硫化物）自旋与能谷物性方面的相关工作，探讨激子与带电激子的谷极化性质及谷相干调控等。

参考文献：

- [1] Phys. Rev. Lett. 117, 226401 (2016).
- [2] Phys. Rev. X 7, 031010 (2017).
- [3] Phys. Rev. B 111, L241403 (2025).
- [4] Phys. Rev. B 110, 125420 (2024)
- [5] Phys. Rev. B 107, 205407 (2023)
- [6] Phys. Rev. B 108, 035419 (2023).
- [7] Phys. Rev. B 108, 235429 (2023).
- [8] Phys. Rev. B 106, 155420 (2022).
- [9] Phys. Rev. B 104, 165428 (2021).
- [10] Phys. Rev. B 104, 125426 (2021).
- [11] Phys. Rev. B 104, 195424 (2021).

Z-170

二维钙钛矿能带自旋轨道劈裂的深度学习预测

赵润东^{*1}、梁德杨¹、潘政¹、宋汝怿²

1. 北京航空航天大学

2. DP Technology

二维钙钛矿结构是重要的前沿光电材料，其能带通常易呈现较明显的 Rashba/Dresselhaus 自旋劈裂现象，如何调控劈裂强度是自旋电子学中所关注的一项重要问题。过去的实验及计算研究中，我们发现这类结构中无机骨架上的特定键长或键角畸变会打破局部反演对称性，从而影响前线轨道中的自旋轨道耦合强度。通过有序调控相关畸变，有望加速发现具有强自旋劈裂效应的潜在材料。本研究中，我们结合第一性原理计算与深度学习模型，系统性揭示了面内少数关键金属-卤素原子的键长/键角畸变与自旋轨道劈裂之

间的强相关性。与常规材料机器学习流程高度依赖大规模、高成本计算样本不同,该方法通过精选具有物理意义的结构特征,仅以很低成本对简化无机结构进行训练,便可实现对复杂有机-无机杂化体系的有效泛化,显著降低了对计算资源的依赖。总体来看,模型对自旋劈裂是否存在的定性判断准确率达到 100%,在定量预测实验结构的劈裂强度方面准确度超过 80%。相关方法可进一步用于未知体系的自旋劈裂预测与高通量材料筛选。

Z-171

过渡金属硫族化合物异质结构中不同 Weyl 量子态的共存

吴佳芳¹、吕海峰²、孟利军^{*3}

1. 成都师范学院
2. 电子科技大学
3. 湘潭大学

拓扑半金属已经在不同类型的玻色子和费米子系统中得到了系统的研究,但拓扑声子和电子在同一材料中的共存却鲜有报道。在这项工作中,基于过渡金属硫族化合物丰富的拓扑特性提出了一种通过构造夹层结构的过渡金属碲化物异质结结构实现拓扑声子和电子共存的策略,并通过第一性原理计算实现了该体系拓扑性质的理论分析。 Mo_2Te 三层原子结构的空群为 $P4mm$ (No. 99),该结构具有分子动力学稳定性和热稳定性。在费米能级上,它是一个具有第二类为 Weyl 锥的 Weyl 半金属,其拓扑结构源于 Mo 原子的 d 轨道和 Te 原子的 p 轨道之间的能带反转。此外, Mo_2Te 三层原子结构呈现沿高对称路径 $X-\Gamma-Y$ 相交的 Weyl 声子。量子化的 Berry 相位、相反称性特征值以及明显的电子和声子拓扑边缘态都是 C_{4v} 对称性产生的拓扑保护的有效证明。最值得注意的是,在该体系中拓扑声子态和电子态之间的电声子耦合揭示了独特的空间选择性和对称性。对 Mo_2Te 三层原子异质结构的理论研究不仅预测了 Weyl 费米子和 Weyl 声子的共存,而且为二维纳米材料的拓扑态设计提供了一种新的方法。

Z-172

能谷多重霍尔效应和手性自旋-能谷锁定

贾康

曲阜师范大学物理工程学院

Z-173

LaMnO₃ 超晶格中的磁相变机制——恢复破缺的对称

付召明

云南师范大学

在低温下 LaMnO_3 块体是 A 型反铁磁性 (A-AFM) 的,但实验表明 SrTiO_3 衬底上的 LaMnO_3 薄膜是铁磁性 (FM) 绝缘体。这种从 AFM 到 FM 态的磁转变 (AFM $\rightarrow$ FM) 引起了人们的强烈的兴趣,但是其物理机制长期以来仍存在争议。在 LaMnO_3 块体中, MnO_6 八面体晶体场具有显著的面外畸变。相应地,Mn 离子的两个 eg 轨道是非简并的。本文研究发现,生长在 SrTiO_3 衬底上的 LaMnO_3 薄膜因其晶格失配而导致原有的晶体场畸变大大降低,其结果是 MnO_6 八面体的晶场对称性在很大程度上得到了恢复。这种对称性恢复导致 Mn 的两个 eg 轨道出现近简并行为。为了证实这种简并确实源于对称性恢复,我们进一步研究了压缩应变引起的晶体场对称性再破缺,结果发现当对称性出现再次破缺的情况时, LaMnO_3 薄膜中两个简并的 eg 轨道会再次发生劈裂,同时发生了反向的磁转变,即从 FM 到 AFM 态的转变 (AFM $\leftarrow$ FM)。这些结果表明,轨道简并与磁序之间存在着密切关联。另一方面,为了理解磁性离子和氧之间的超交换机制,我们通过投影轨道分析去揭示块体和薄膜体系中 Mn 的 d 轨道与氧的 p 轨道的杂化行为,并根据这些结果,我们指出块体和薄膜体系中存在不同的超交换机制。尤其是在薄膜体系中,轨道简并效应可能会导致一种新的超交换机制,这为 LaMnO_3 薄膜的磁转变提供了较为新颖的解释。这种机制也可能适用于理解其他钙钛矿薄膜或异质结构中的磁相变机理。

Z-174

二维面外极化铁电隧道结设计

郑小宏

南京林业大学

铁电隧道结因伴随着外电场下铁电极化方向的反转而表现出高低两个电阻态，可以用于表示二进制的“0”和“1”，从而在非易失性存储中具有重要的应用潜力，并引起了广泛关注。铁电隧道结研究的核心问题之一是如何获得高的隧穿电致电阻（TER）比率。尽管传统的铁电隧道结已经可以获得很高的 TER 比率，但它主要以三维钙钛矿铁电薄膜作为隧穿势垒，其铁电稳定性和结构稳定性均高度依赖于铁电薄膜的厚度，这导致了传统铁电隧道结隧穿势垒层的临界厚度问题：铁电层太薄时，可能导致结构失稳和铁电性消失。这使得其高密度存储应用方向面临发展瓶颈。采用新的设计理念和新型铁电材料成为突破这一瓶颈的重要思路。二维铁电材料由于其原子层级厚度、结构稳定和铁电性稳定等天然优势而为解决上述问题提供了重要选择。基于密度泛函理论和非平衡格林函数方法，我们率先开展了二维铁电隧道结的模拟设计研究，并发现：利用具有面外极化的二维铁电材料构建的范德华铁电隧道结可以实现极高的 TER 比率，其基本原理是铁电极化方向反转可以实现可逆层间电荷转移并进而驱动材料整体发生绝缘体金属转变。同时，利用面外极化二维铁电材料构建的多铁隧道结，可以方便地实现 100%自旋极化输运、巨磁阻、巨电致电阻以及 Stoner 磁性调控。本报告将介绍近年我们在基于 Graphene/In₂Se₃、Au/In₂Se₃、Sc₂CO₂/In₂Se₃ 的铁电隧道结以及 LaBr₂/In₂Se₃、VSi₂N₄/In₂Te₃、VSiN₃/Sc₂CO₂ 的多铁隧道结等典型案例的研究结果，并特别提出一种基于合理选择组分材料功函数和带隙的二维铁电和多铁隧道结的可行设计方案。

主要论文：

Phys. Rev. B 101, 014105 (2020)

Phys. Rev. B 102, 245417 (2020)

Phys. Rev. B 103, 125414 (2021)

Phys. Rev. B 107, 115427 (2023)

Phys. Rev. B 109, 094105 (2024)

Phys. Rev. B 110, 115439 (2024)

Phys. Rev. B 110, 235408 (2024)

Phys. Rev. Applied 23, 054085 (2025)

Z-175

联合对称性对 MnBi₂Te₄ 相关材料磁序与输运性质的调控作用

曹腾飞

西北工业大学

不同于顺磁材料或者铁磁材料，在反铁磁材料中存在着大量的联合对称性比如镜面对称（M）与时间反演（T）的联合对称性（MT），中心反演（P）与 T 的联合对称性（PT）。联合对称性一方面决定了材料磁序与相关输运特性，另一方面也为材料性质的调控提供了有效的方式。在这次报告中，我们首先介绍反铁磁中关联对称性与其磁序与输运性质的关联，接着我们以 PT 与 MT 对称性为例介绍通过关联对称性实现的材料性能的有效调控。比如：在两层 MnBi₂Te₄ 中，通过范德华材料层间的滑移可以破坏其本征的 PT 对称性，并在不同电极化态之间建立起 MT 对称性关联，进而实现对反常霍尔电导的有效调控[1]；在四层 MnBi₂Te₄ 中通过不同反铁磁态直接 PT 对称性的关联，可以实现对量子化反常霍尔电导的有效调控[2]；在 3MnBi₂Te₄.2Bi₂Te₄ 中通过构建 PT 对称性的关联，可以实现对其磁序的线性调节等[3]。

[1] Tengfei Cao*, Ding-Fu Shao*, Kai Huang, Gautam Gurung, Evgeny Y. Tsymbal*, Switchable Anomalous Hall Effects in Polar-Stacked 2D Antiferromagnet MnBi₂Te₄, Nano Letters, 23, 9, 3781–3787(2023).

[2] Ziyu Niu, Xiang-Long Yu, Dingfu Shao, Xixiang Jing, Defeng Hou, Xuhong Li, Jing Sun, Junqin Shi, Xiaoli Fan*, and Tengfei Cao*, Interlayer ferroelectric polarization modulated anomalous Hall effect in four-layer MnBi₂Te₄ antiferromagnets, Physical Review B, 109, 174405 (2024).

[3] Ziyu Niu#, Jing Sun#, Zekun Zhang, Xiaohong Zheng, Xixiang Jing, Jingjing Wan, Jing Wang, Junqin Shi, Li-min Liu, Weimin Liu*, Xiaoli Fan*, Tengfei Cao*, PT- Symmetry Controlled Magnetic Order Switching, Npj Computational Materials (Accepted) (2025).

Z-176

滑移铁电材料缺陷和掺杂效应的第一性原理研究

吴宇宁

华东师范大学

Z-177

多尺度模拟铅基铁电矫顽场

刘仕*

西湖大学

铅基铁电的超高矫顽场问题是制约其实际应用的瓶颈。决定铅基铁电矫顽场的极化翻转机制，特别是成核限制翻转(NLS)模型中的三维形核形成机制与 Kolmogorov-Avrami-Ishibashi (KAI)模型中的畴壁运动机制，在原子尺度层面的机理尚未形成系统认识。我们发展了一种深度学习辅助的多尺度模拟方法，通过分子动力学模拟揭示了关键成核机制，实现了对 NLS 型和 KAI 型矫顽场的统一理论预测。我们发现 NLS 型矫顽场数值不仅与实验结果高度吻合，还能准确描述 3 至 20 纳米薄膜矫顽场的厚度依赖规律。这表明铅基铁电的超高矫顽场源于其超薄几何约束，导致极化翻转完全受 NLS 机制主导。另一方面，KAI 型矫顽场的理论下限可降至 0.1 MV/cm，这表明通过激活畴壁运动，可有效降低矫顽场。基于此理论指导，我们在 60 纳米厚超晶格中获得了 1 MV/cm 的低矫顽场，实验验证了 KAI 机制调控的有效性。这些发现构建了理解铅基铁电极化翻转动力学的基本理论框架，同时为通过几何结构设计与畴壁工程策略开发低矫顽场器件提供了新思路。

Z-178

表面工程调控二维 CrTe₂磁基态的理论预测

王聪*

中国人民大学

新兴二维磁性材料在外场调控、测试表征和器件小型化等方面具有优势，为基础研究及其潜在自旋电子学应用提供了新材料平台。寻找合适的方式调控二维磁性是当下兼具科学意义与应用前景的重要问题。尽管材料表面重构与氧化常影响电子结构等物性，但是其对二维磁性的调控机制尚缺乏系统研究。我们的研究表明，CrTe₂ 表面氧化与重构可有效调控层间磁基态与磁矩取向，进而诱导实验观测的阶梯状磁转变。此外，我们研究发现可以通过对 CrTe₂ 进行表面处理构建 Janus 结构，有望实现 CDW 转变导致的磁基态调控，为二维磁性设计提供新思路。

Z-179

材料机电响应多序构调控的相场研究

杨天南*

上海交通大学

铁性材料中，极化、应变、反铁电序、电子浓度、自旋等多种序构之间可产生动态耦合与竞争，其对外场的共同响应决定着材料的基本物理性质。通过对材料多个稳定相与亚稳定相的能量进行精准控制，改变多个序构间的相对稳定性，可有效调制材料行为，实现材料多功能宏观物性的关键调控。我们开展了铌酸钠铁性薄膜机电耦合性质的研究，提出了通过创造极化-反铁电序共存与竞争获得材料超高压电性的材料设计策略。在对体系的相场理论研究中，我们通过构建描述铁电极化与反铁电序的相场模型中铌酸钠的基本材料常数，模拟了铁电相与反铁电相共存的材料微结构的形成与在电场下的演化。进一步，揭示了铁性序构竞争提升体系电致应变的内在机制，厘清了相界面行为与对压电性质的作用原理，为利用铁性序构竞争实现材料机电耦合性质的调控与优化设计提供了理论依据。

Z-180

从滑移铁电到超滑铁电

吴梦昊

华中科技大学

我们在早期提出的滑移铁电机理使大多非铁电二维材料可以通过堆叠诱导层间不对等，产生一种在电场下以层间水平滑移翻转的垂直铁电，翻转势垒较传统铁电普遍降低约 2 个量级，在层间扭角下还会产生

一种铁电摩尔超晶格，目前已被一系列实验在多种二维多层体系证实。最近我们进一步提出了一种跨层滑移铁电机理，通过计算发现某些体系邻层堆叠构型是对称的，但隔层堆叠构型却能产生对称破缺和垂直极化，在电场下仍可驱动层间滑移使铁电翻转；特定单层/多层石墨烯摩尔超晶格体系（比如 1+3 层转角体系）具有单一方向极化畴和非极化畴共存，使得体系在零电场下具有非零的总极化，且可以通过层间滑移来翻转，不同的铁电态具有显著不同的摩尔能带结构。如果在滑移铁电双层中间插入异质单层引入非公度界面，跨层滑移铁电机理仍能保证其垂直极化稳定存在同时还可产生结构超滑，铁电翻转势垒有望进一步降低约 1-2 个量级，使铁电写入空前高速低耗。

Z-181

第四类磁材料及其反常输运物性

冯万祥

北京理工大学

在本文中，我们基于自旋层群分析方法，识别出一类此前被忽视的二维共线磁性材料。该类材料不同于已知的铁磁体、反铁磁体和交错磁体，可归为第四类磁性材料。该新型磁相在非相对论极限下呈现出自旋简并的能带结构，类似于传统反铁磁体，但在引入自旋轨道耦合（SOC）后，又展现出铁磁体和交错磁体中典型的时间反演对称性破缺响应，例如反常霍尔效应（AHE）。通过系统的第一性原理计算，我们从多个二维材料数据库中筛选出具备此类磁性的候选材料，涵盖所有对称性允许的非平庸自旋劳厄群。以单层 HfS 为代表性例子，我们展示了非相对论性自旋简并能带的形成，并揭示其在 SOC 作用下演化为显著的反常输运行为。值得一提的是，我们发现了一种由自旋中性电流驱动的 AHE，同时伴随着一种对称性保护、在整个动量空间内持续存在的自旋纹理。本工作不仅拓展了低维磁性的理论框架，也为下一代自旋电子学功能的材料设计提供了坚实的平台，展现出该新型二维磁性材料体系在工程应用中的广阔前景。

参考文献：

Bai, Zhang, Feng*, and Yao*, arXiv:2504.08197, Phys. Rev. Lett. (under review).

Z-182

二维单层及多层铁电 CuInP_2S_6 中偶极矩相互作用的理论研究

赵锦柱

华南师范大学

二维 CuInP_2S_6 (CIPS) 是一种被广泛研究的铁电材料，其显著的面外铁电极化吸引了众多的关注。近年的研究显示，二维 CIPS 的铁电行为有很多独特的性质，例如理论研究显示其巨大的极化翻转势垒，样品依然有良好的铁电行为；此外随着样品厚度的变化，铁电畴的尺寸也显著改变，等等。由于对其铁电相形成的物理机制尚有不足，这些现象都缺乏有力的理论解释。在我们的工作中，基于第一性原理计算以及蒙特卡洛等数值方法，系统研究了二维 CIPS 中铁电序的物理起源。我们注意到不同于传统钙钛矿氧化物铁电材料，二维 CIPS 中偶极矩之间的库仑相互作用在形成铁电序的过程中扮演了不同角色。面内的偶极作用相对很弱，使得系统在零外场下倾向于形成无序不规则的极化图案并且在外电场下易于被极化，从而形成极化方向统一的铁电态。此外，层间的偶极作用则有助于形成稳定的面外极化态从而在层数增加条件下形成明显的铁电畴。这些结果不仅有助于理解其丰富的现象，更为调节其中铁电畴结构等相关行为提供了理论依据。

Z-183

二维双切换铁电交错磁体：电控自旋与磁振子手性劈裂

王磊

内蒙古大学

在自旋电子学与磁子学蓬勃发展的当下，对兼具新颖磁序和多功能调控潜力的材料探索已成为核心前沿。本报告提出并预测了一类全新的二维材料——双切换铁电交替磁体（FEAMs）。我们发现，在这类材料中，可翻转的铁电极化（P）能够作为一个独特的开关，首次实现对电子自旋劈裂（S）和磁振子手性劈裂（M）的精准同步调控。这为在单一原子层材料内部，统一地电学操控基态电子自旋态与集体磁振子激发提供了一条前所未有的途径。我们通过深入的对称性分析，并结合对通过数据库筛选出的典型候选材料（如 CrPS_3 和 $\text{V}_2\text{I}_2\text{O}_2\text{BrCl}$ ）进行的第一性原理计算，系统阐明了其核心机制：由特定原子位移驱动的铁

电性巧妙地打破了晶体反演对称性，但同时又关键性地保留了例如[C2 || M]等特定晶体对称性。正是这种独特的对称性协同效应，使得电极化 ($\mathbf{P}$) 能够与交替磁体中本征的电子结构 (表现为自旋劈裂 $\mathbf{S}$) 以及控制磁振子手性的各向异性交换相互作用 ($\mathbf{M}$) 实现紧密耦合。计算结果清晰且有力地表明，反转极化方向 ($\mathbf{P} \rightarrow -\mathbf{P}$) 将同步导致电子自旋分裂符号的反转 ($\mathbf{S} \rightarrow -\mathbf{S}$)，并使磁振子模式的手性亦随之反转 ($\mathbf{M} \rightarrow -\mathbf{M}$)。这种标志性的“双切换”效应，预计可通过磁光克尔效应符号反转等实验手段进行直接且灵敏的检测。此项工作不仅为在二维体系中实现对耦合电子与磁子特性的电学操控开辟了一条材料特异性的新路径，更为未来新型多功能自旋电子学与磁子学器件的开发奠定了坚实的基础。值得强调的是，我们还进一步预测了实验合成的三维纳长石材料亦是一种典型的交替磁体，并详细计算了其非相对论自旋劈裂能带、手性自旋波及其手性磁光克尔效应。我们深入分析了手性自旋波色散的形成源于交替磁体对称性导致的海森堡模型中各向异性的交换常数，并揭示了交替磁体中非磁性原子形成的局域手性如何在晶体中诱导晶体手性磁光克尔效应。这一拓展性研究不仅验证了本理论框架的普适性，也为探索更多新型手性磁性材料指明了方向。

Z-184

双层 A 型堆叠设计二维交错磁体

王珊珊

东南大学

交变磁体作为独立于传统铁磁体和反铁磁体的新型磁性分支，近期引起了广泛关注。目前研究者已证实了多种三维交变磁体的存在，但二维交变磁体的研究仍处于探索阶段。本次报告中，我将系统探讨二维交变磁体的对称性操作及其候选材料体系，讨论二维单层和双层交错磁性材料。我们发现 RuF_4 单层材料是一种本征的二维 d 波交变磁体，我们还讨论了该材料的 DMI 效应以及反常霍尔效应等性质。针对二维本征交错磁体较少的问题，我们提出了一种二维交变磁体的人工设计策略：双层反向堆叠法。该方法可诱导体系产生本征的交变磁体型自旋劈裂，且这种自旋劈裂能够通过晶体手性进行调控。我们以特定堆叠方式的双层 PtBr_3 和 MnBr_3 为具体实例，成功验证了这一设计原理。

Z-185

Electric-Field-Induced Switchable Two-Dimensional Altermagnets

Dinghui Wang¹, Wang Huaiqiang², Liu Lulu³, Zhang Junting^{*1}, Zhang Haijun⁴

1. China University of Mining and Technology

2. Nanjing Normal University

3. Xiaozhuang University

4. Nanjing University

Altermagnetism, as a recently discovered unconventional antiferromagnetism, allows the lifting of spin degeneracy without net magnetization. The spin splitting of the intrinsic altermagnets is protected by the spin space group symmetry and is therefore difficult to control externally. Here, we propose an extrinsic altermagnet as a complement to the intrinsic altermagnet, whose spin splitting is induced by and can be significantly modulated by the electric field. We then screened intrinsic and extrinsic altermagnets by combining symmetry analysis and high-throughput calculations, identifying 16 intrinsic altermagnets and 24 extrinsic altermagnets. We demonstrate that the spin splitting of extrinsic altermagnets is proportional to the electric field strength, and its sign can be switched by reversing the electric field. Some extrinsic altermagnets exhibit considerable spin splitting, such as CaMnSi with 398 meV under an electric field of 0.1 V/Å. This work provides a realistic material platform for the potential application of 2D altermagnets.

Z-186

太赫兹激发驱动的二维 CrSBr 超快磁结构动力学

霍亦琦

电子科技大学

Z-187

高性能二维磁性材料的超原子构筑和磁性调控

郭平

西北大学

超薄二维磁性材料作为革新自旋电子器件的核心材料，不仅是构筑新一代信息存储与处理单元的关键载体，更是探索二维量子限域效应下新奇磁性的理想平台。然而，由于低维材料易受热涨落等环境因素影响，多数超薄二维材料缺乏本征磁性。研究表明，磁各向异性是二维材料磁有序稳定存在的必要条件，基于晶体对称性设计和磁性调控，理论上已提出多种二维本征铁磁材料模型，然而实验上想实现高居里温度二维铁磁材料的可控制备，依然面临严峻挑战，发展“自下而上”功能基元组装方法有望成为解决材料性能问题的有效途径。

随着纳米技术飞速发展，功能基元的人工序构已成为突破传统材料性能瓶颈、挖掘新奇物理效应的前沿范式。与二维材料类似，具有丰富物化特性的原子团簇为新型材料开发提供了大量功能基元[4]。本课题组聚焦二维磁性材料前沿，筛选并设计一系列实验上容易制备的磁性超原子团簇为构筑单元，开展二维铁磁材料的可控组装研究。以 TM@Si_{16} 、 TM@Sn_{12} 、 MnCl_3 、 Mn@Sr_9 等典型超原子团簇为研究对象，借助第一性原理计算，深入研究组装二维材料的稳定性、磁性和电子结构，成功发现了数种兼具强磁各向异性与较高磁转变温度的二维磁性材料体系，揭示其稳定性和磁性产生机制，并通过应力、原子掺杂等调控手段，实现了对材料磁性能的精准调控，为高性能二维磁性材料的开发提供了重要理论依据与技术支撑。

Z-188

钙钛矿分子类似物中的复杂磁性

李相国、侯仰龙*

中山大学

钙钛矿 ABO_3 型金属氧化物已被发现具有极其有趣的特性，例如铁磁性或铁电性，甚至是两者的组合（多铁性），这使它们对于许多新的 21 世纪应用（例如自旋电子学）极具吸引力。最近发现并合成的钙钛矿分子类似物（化学式简写为 Ce_3TM_8 ，TM 为过渡金属）由于含有混合价态并且同时拥有 d 和 f 电子，从而包含丰富的物理以及复杂的磁性机理。我们利用第一性原理计算结合基础物理理论模型系统研究了一系列磁性分子的磁性机理以及 f 电子在其中的作用。在 Ce_3Mn_8 中，Mn-Mn 之间的铁磁和反铁磁交换最终形成了与块体钙钛矿类似的 C 型反铁磁基态。Ce-f 轨道还能提供一种不寻常的 Mn-Ce-Mn 直接铁磁作用。相对于 MnIII 多一个 $d\sigma$ 电子的 FeIII 离子之间能够表现出强烈的反铁磁 Fe-O-Fe 超交换相互作用。此外涉及中心 Ce-f 轨道的 Fe-Ce-Fe 铁磁相互作用展现出了明显的不对称性。而在少一个 $d\sigma$ 电子的 CrIII 中，由于 t-e 杂化作用的引入展现出了非常规的铁磁主导的相互作用。此外 t-e 轨道杂化对 Cr-O-Cr 角度的极大敏感性能导致 Ce_3Cr_8 中磁相互作用的显著变化。而费米能级附近的 Ce-f 轨道则可以通过虚拟电荷转移过程与 Cr-d 轨道相互作用，从而大大降低这种敏感性。这些发现完善了包括稀土元素 f 轨道在内的钙钛矿型材料超交换磁性理论，同时引入了一种通过调整过渡金属 d 轨道与稀土金属 f 轨道的相互作用来微调低维材料磁特性的新途径。

Z-189

铜系磁有序材料中声子性质的理论研究

胡淑贤

北京科技大学

本报告将具体介绍通过大规模的高通量计算，和后续定制的搜索和筛选，我们预测了 40 种具备潜在高性能磁体特征的铜系材料，发现铜系合金材料受自旋轨道耦合效应的影响，具有显著的磁各向异性。结合量子化学计算方法和高通量算法，报告人发展了一套快速、高效的筛选流程，以加速新型铜系材料的研发。

Z-190

Control of magnetism and valley physics in two-dimensional lattices

Xinru Li*

Shandong University

The control of magnetism and valley physics in two-dimensional (2D) materials is pivotal for next-generation spintronic and valleytronic devices. This work presents two complementary strategies for engineering magneto-valley coupling in 2D lattices. First, we demonstrate spontaneous valley polarization in antiferromagnetic semiconductors via PT-symmetry breaking. Using monolayer NiRuCl₆ as a platform, intrinsic staggered sublattice potentials enable reversible anomalous valley Hall (AVH) effect switching through sublattice magnetic reversal, while maintaining zero net magnetization and large valley polarization. Second, we establish ferroelectric-driven magnetic phase control in van der Waals homobilayers. In Ti₂NO₂ bilayers, interlayer charge transfer mediated by ferroelectric polarization triggers reversible antiferromagnetic-to-ferromagnetic transitions. Crucially, the AFM phase hosts coexisting layer-polarized valley/spin Hall currents enabling nonvolatile electrical switching of both valley and spin degrees of freedom.

Z-191

基于 VS₂N₄/Sc₂CO₂ 二维磁电异质结的新型自旋场效应晶体管研究

张弦

西安文理学院

自旋场效应晶体管 (SFET) 作为自旋电子学领域的重要研究方向, 具有广泛的应用前景。传统的 SFET 通常依赖自旋进动的 π 相位差来控制开关状态, 但实现这一功能需要精确的门电压控制, 并面临非易失性的挑战。本工作中, 我们基于 VS₂N₄/Sc₂CO₂ 构建了一种范德华铁磁/铁电异质结构的非易失性 SFET。第一性原理计算结果表明, Sc₂CO₂ 的铁电极化翻转引起的界面电荷转移效应可以有效调节 VS₂N₄ 的自旋电子态, 使其从半金属过渡到半导体, 显著改善自旋电子传输性能。我们进一步基于该异质结构设计了新型 SFET 器件, 并通过第一性原理格林函数方法计算其电子输运性质。结果表明, 在小偏压 (0.02 V) 下, Sc₂CO₂ 铁电极化的翻转可产生约 650% 的开关电流比。此外, 我们还发现了一种独特的自旋传输现象, 其中自旋向上的电子仅通过 VS₂N₄ 传输, 而自旋向下的电子通过 Sc₂CO₂。这一发现为低能耗、非易失性 SFET 器件的开发提供了理论基础。

参考文献:

[1] Xian Zhang, Bang Liu, Junsheng Huang, Xinwei Cao, Yunzhe Zhang, Zhi-Xin Guo, Nonvolatile spin field effect

transistor based on VS₂N₄/Sc₂CO₂ multiferroic heterostructure, Phys. Rev. B 109, 205105 (2024).

Z-192

Tunable altermagnetism via inter-chain engineering in parallel-assembled atomic chains

Deping Guo

Sichuan Normal University

Altermagnetism has recently drawn considerable attention in three- and two-dimensional materials. Here, we extend this concept to quasi-one-dimensional (Q1D) monolayers assembled from single-atomic magnetic chains. Through systematically examining nine types of structures, two stacking orders, and intra-/inter-chain magnetic couplings, we identify four out of thirty promising structural prototypes for hosting altermagnetism, which yields 192 potential monolayer materials. We further confirm eight thermodynamically stable Q1D monolayers via high-throughput calculations. Using symmetry analysis and first-principles calculations, we find that the existence of altermagnetism is determined by the type of inter-chain magnetic coupling and predict three intrinsic altermagnets, CrBr₃, VBr₃, and MnBr₃, due to their ferromagnetic inter-chain couplings and five extrinsic ones, CrF₃, CrCl₃, CrI₃, FeCl₃, and CoTe₃, ascribed to their neglectable or antiferromagnetic inter-chain couplings. Moreover, the inter-chain magnetic coupling here is highly tunable by manipulating the inter-chain spacing, leading to experimentally feasible transitions between altermagnetic and nodal-line semiconducting states. In addition, applying external electric fields can further modulate the spin splitting. Our findings establish a highly tunable family of Q1D altermagnets, offering fundamental insights into the intricate relationship between geometry, electronic structure, and magnetism. These discoveries hold significant promises for experimental realization and future spintronic applications.

Z-193

Giant Tunneling Magnetoresistance Based on Spin-Valley-Mismatched Ferromagnetic MetalsKun Yan¹, Li Chen², Yizhi Hu¹, Junjie Gao¹, Xiaolong Zou², Xiaobin Chen^{*1,3}

1. Harbin Institute of Technology, Shenzhen

2. Shenzhen Geim Graphene Center and Shenzhen Key Laboratory of Advanced Layered Materials for Value-added Applications, Institute of Materials Research, Tsinghua Shenzhen International Graduate School, Tsinghua University, Shenzhen 518055, China

3. Collaborative Innovation Center of Extreme Optics, Shanxi University, Taiyuan 030006, China

Half metals, which are amenable to perfect spin filtering, can be utilized for high-magnetoresistive devices. However, available half metals are very limited. Here, we demonstrate that materials with intrinsic spin-valley-mismatched (SVM) states can be used to block charge transport, resembling half metals and leading to giant tunneling magnetoresistance. As an example, by using first-principles transport calculations, we show that ferromagnetic $1T\text{-VSe}_2$, $1T\text{-VS}_2$, and $2H\text{-VS}_2$ are such spin-valley-mismatched metals, and giant magnetoresistance of more than 99% can be realized in spin-valve van der Waals (vdW) junctions using these metals as electrodes. Owing to the intrinsic mismatch of spin states, the central-layer materials for the vdW junctions can be arbitrary nonmagnetic materials, in principle. Our research provides clear physical insights into the mechanism for high magnetoresistance and opens new avenues for the search and design of high-magnetoresistance devices.

Z-194

 sd -Wave Flat Fermi Surface in Altermagnets Enables large Charge-to-Spin Conversion

Junwen Lai, Yan Sun*

IMR CAS

Altermagnets represent an emerging class of materials in condensed matter physics, combining an antiferromagnetic ground state with spin-splitting effects typically found in ferromagnets. This unique duality enables ultrafast spin-dependent responses, offering new opportunities for spin-current generation—a critical advancement for overcoming the limitations of conventional spin-transfer and spin-orbit torques in magnetic memory technologies. In this work, we establish a fundamental relationship between Fermi surface geometry and time-reversal-odd (T-odd) spin currents in altermagnets. This mechanism is realized in the newly discovered room-temperature altermagnetic metal $\text{KV}_2\text{Se}_2\text{O}$, which exhibits a charge-to-spin conversion efficiency of $\sim 78\%$. Our work advances the fundamental understanding of T-odd spin currents via Fermi surface geometry engineering and provides key insights for developing next-generation altermagnet-based memory devices.

Z-195

人工智能加速热管理材料设计开发的探索张健^{1,4}、冯世豪^{2,4}、安盟^{1,4}、徐涛³、霍永隽¹、张刚^{*1,4}

1. 北京理工大学

2. 陕西科技大学

3. 辽宁伊菲科技股份有限公司

4. 北京理工大学长三角研究院（嘉兴）

纳米尺度热传导是物理学、材料科学和工程热物理等相关学科的研究热点。除基础研究上的意义外，这个方向的研究在微纳米器件温度控制、新能源、热防护等重大工程技术领域也有着重要的应用价值。随着纳米材料科学技术的发展，研究的体系越来越复杂。与此同时，人工智能科学的发展和计算机运算能力的不断提高，为复杂材料体系的研究提供了新的手段，材料的“智能”设计也应运而生，并迅速得到发展。报告人将以自己研究组的研究成果为主，结合当今学科发展前沿，介绍计算材料学在研究材料热传导和热管理材料设计开发方面的应用，着重实验与理论计算研究相结合，并探讨智能材料设计在发现新奇物理效应方面的可能贡献。

文献

1. 《纳米材料热传导》，段文晖，张刚。科学出版社，2017 年。
2. Tian Wang, Cheng Zhang, Hichem Snoussi, Gang Zhang, “Machine Learning Approaches For Thermoelectric Materials Research”, *Advanced Functional Materials*, 30 (5), 1906041, (2020).
3. Zhongwei Zhang, Yulou Ouyang, Yuan Cheng, Jie Chen, Nianbei Li, Gang Zhang, “Size-Dependent Phononic Thermal Transport in Low-dimensional Nanomaterials”, *Physics Reports*, 860, 1–26 (2020).
4. 《Artificial Intelligence for Materials Science》, Tian Wang, Yuan Cheng, Gang Zhang, Springer, 2021.
5. Chenhan Liu, Chao Wu, Yunshan Zhao, Zuhuang Chen, Tian-Ling Ren, Yunfei Chen, Gang Zhang, “Actively and reversibly controlling thermal conductivity in solid materials”, *Physics Reports* 1058, 1–32 (2024).

Z-196

低导热材料的纳米结构设计 with 声子输运物理机制

倪宇翔

西南交通大学

Z-197

热电材料力学行为理论方法与强韧化机制研究

李国栋

武汉理工大学

热电材料是利用 Seebeck 或 Peltier 效应实现热能与电能直接相互转换的重要功能材料。热电材料通常表现为本征脆性，强度和韧性较差，在外载作用下容易破裂，导致机械加工性能较差、加工效率低，在服役过程中易发生破坏失效，服役可靠性差、使用寿命低，发展热电材料力学性能增强理论、显著提升热电材料力学性能是热电转换技术从实验室走向工业化必须突破的瓶颈，对国家战略需求具有重要的支撑作用。

团队长期致力于研究热电半导体力学行为理论方法与强韧化机制研究 (*Mater. Sci. & Eng. R*, 2021, 144: 100607)。本报告主要介绍团队近年的主要创新性成果：开发了一种纳米孪晶和层错策略来增强 Bi₂Te₃、InSb 和 PbTe 半导体 (*Matter*, 2022, 6, 1839; *Matter*, 2023, 6, 3087; *NPJ Comp. Mater.*, 2021, 7, 11)；证明了高密度堆叠层、交错层可以显著增强 Bi₂Te₃ 的层间相互作用，同时提高微柱内的抗压强度和薄膜器件的灵活性，Bi₂Te₃ 的极限抗剪强度增加了两倍 (*Matter*, 2025, 102166)。

Z-198

高分子复合材料导热性能的分子动力学模拟研究

高洋洋

北京化工大学

制备高导热硅橡胶复合材料是制备热界面材料的基础，因此从分子水平理解硅橡胶复合材料的导热机制显得尤为重要。本工作采用反转非平衡分子动力学模拟方法，首先研究了石墨烯网络结构对硅橡胶复合材料导热性能的影响。材料热导率随着石墨烯体积分数上升而上升，这主要归因于更对热流通过石墨烯网络传世。其次，材料热导率随着石墨烯堆叠面积上升而上升，这主要归因于石墨烯网络更强的热传输能力和更多热流传输。材料热导率随着缺陷密度上升先上升后下降。一方面缺陷破坏了石墨烯结构，降低了石墨烯的本征热导率；同时石墨烯缺陷形成界面键增强了石墨烯间热传输能力。随后研究了石墨烯表面取向和粗超度对硅橡胶复合材料导热性能的影响。结果显示界面热导率随着表面取向角从 0 度到 90 度逐渐降低，而界面热导率随着表面粗超度的提高而逐渐上升。这些结果可以很好地用声子振动态密度、界面热功率和热流谱进行合理的解释。同时，界面热导率与界面作用能呈现线性关系。结合有效介质模型，发现计算获得硅橡胶复合材料导热率与实验一致，也验证了模型的正确性。总的来说，本工作有助于从分子尺度上理解填料网络和表面取向度以及粗超度对高硅橡胶复合材料导热率的影响机制。

Z-199

GAA 晶体管的电热耦合和可靠性仿真

曾琅

北京航空航天大学

业界也已经达成共识，从 3nm 节点开始，GAA 晶体管将取代 FinFET 成为主要的晶体管结构。GAA

晶体管具有很小的截面积，这会导致严重的量子限制效应。商业用的器件仿真工具通常使用密度梯度模型来仿真量子效应，但是这样会带来几个问题：1) 密度梯度模型里面的参数需要校准；2) 校准后的密度梯度模型的参数是否具备泛化能力是个疑问，这极大的削弱了器件仿真工具的预测能力；3) 密度梯度模型的引入，极大的影响了扩散漂移方程本身的稳定性和收敛性。但是 GAA 晶体管的全量子仿真的计算量过于庞大，阻碍其进入实用。在本报告中，我们将详细介绍如何利用模空间方法，实现 GAA 晶体管的高效器件仿真。同时我们还将介绍模块化设计的思想，模空间方法的两个重要部分，横截面方向和输运方向都可以使用模块化设计思想。不同的哈密顿量模型， $k \cdot p$ 模型、紧束缚近似模型和有效质量近似模型，都可以用于横截面方向的薛定谔方程。而不同的输运模型，量子输运、玻尔兹曼输运方程和扩散漂移方程，都可以用于输运的处理。基于模空间高效算法，我们考虑三维互连线的影响，进一步求解了电热耦合输运，对 GAA 晶体管的自热效应进行了评估，从而获得了 GAA 晶体管沟道中电子随着能量的准确分布。最后，考虑不同晶面上的界面缺陷产生模型，我们详细评估了 GAA 晶体管中由于热载流子导致的可靠性退化效应。

Z-200

Design of Novel Perovskite-Based Semiconductors as Photovoltaics and Thermoelectrics

Dan Han^{*1}, Kieran Spooner¹, Bonan Zhu², Zenghua Cai³, David O. Scanlon⁴, Thanh Chau⁵, Wolfgang Schnick⁵, Thomas Bein⁵, Hubert Ebert⁵, Lijun Zhang¹

1. Jilin University

2. Beijing Institute of Technology

3. Suzhou University of Science and Technology

4. University of Birmingham

5. University of Munich

Crystal structure prediction has become an effective approach for the theoretical design of novel semiconductor materials. Here, based on the anion (cation) mutation and crystal structure prediction methods, we designed new multinary nitride antiperovskites as thermoelectrics and layered multinary nitride antiperovskite derivatives as photovoltaic absorbers (Matter, 2024, 7(1): 158–174; Angew Chem Int Ed Engl, 2025, 64(17): e202500768). The phase stability of $X_6\text{NFSn}_2$ ($X = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) and their thermal and electrical transport properties have been studied using first-principles calculations. These materials exhibit low room-temperature lattice thermal conductivity and excellent electrical properties. Through modal analysis based on the single-mode relaxation-time approximation (RTA) and chemical bonding analysis, we further revealed the reasons for the low lattice thermal conductivity of these materials. For photovoltaic absorbers, we successfully predicted a new class of layered multinary nitride perovskite derivatives with defective octahedra, which show excellent optoelectronic and out-of-plane transport properties. Among them, three candidates with relatively good optoelectronic performance have already been experimentally synthesized.

Z-201

新型 Zintl 相功能半导体设计与热输运调控

付钰豪

吉林大学

Z-202

低温四声子散射与层间耦合在二维材料中诱导的新奇热输运现象

郭志新*

西安交通大学

二维材料因其优异的物理性质在新能源、电子信息等领域展现了广阔的应用前景。作为其基本物性之一，热输运性质的研究对二维材料的器件设计与应用具有重要意义。近年来的研究表明，四声子散射在中高温区域对二维材料的热输运性质具有显著影响。然而，基于四声子散射速率在低温下较小的假设，其在低温下的贡献常常被忽视。同时，层间耦合作用能够在层状范德华材料中诱导出一系列新奇的电子性质。例如，层间滑移能够使 h-BN 材料在跨层方向展现铁电性，而转角石墨烯体系中的层间耦合则可能诱

发超导性、磁性和拓扑性等独特性质。然而，层间耦合是否会对热输运性质产生新奇的影响，也是一个值得探讨的问题。本报告基于第一性原理计算、玻尔兹曼输运方程（BTE）和非平衡分子动力学（MD）方法，探讨了二维材料中低温热输运现象以及范德华材料中层间耦合引起的几种新奇热输运效应。主要结果如下：（1）通过研究 h-XN（X = B, Al, Ga）体系，我们发现四声子过程，特别是涉及 ZA 声子模式的过程，在低温下对热导率具有异常强的影响。该效应导致热导率的显著降低，并且可以通过应变工程加以有效调控。（2）通过对 h-BN/双层石墨烯/h-BN 体系的研究，我们揭示了层间范德华耦合对二维材料热输运性质的“双通道”调控效应。我们发现，层间耦合作用对双层石墨烯中面外（out-of-plane）声子模式和面内（in-plane）声子模式的热导率产生截然不同的调控效应：一方面，它显著降低了出层声子的热导率，另一方面，它显著增强了面内声子的热导率，且这一调控效应显著依赖于层间耦合的强度。基于该机制，我们解释了最近实验上观测的转角石墨烯热导率“准平庸性”，并提出了获得“非平庸性”转角热导率的调控方案。

参考文献：

[1] H. Feng, B. Liu, Z. X. Guo*, Unusually Strong Four-Phonon Scattering Effects on Low-Temperature Thermal

Conductivity in Two-Dimensional Materials, arXiv:2312.16761v2

[2] F. Feng, S. Wang, and Z. X. Guo*, Giant twist-angle dependence of thermal conductivity in bilayer graphene

originating from strong interlayer coupling, Phys. Rev. B 108, L241405 (2023).

[3] H. Feng, B. Liu, Z. X. Guo*, Nontrivial impact of interlayer coupling on thermal conductivity: Opposing trends in in-plane and out-of-plane phonons, Phys. Rev. B 110, 214304 (2024).

Z-203

微纳米异质结的界面热输运研究

任凯*

南京林业大学

微纳米传热研究在能源利用、电子器件散热、新材料开发等领域具有重要意义。随着器件尺寸不断缩小至微米乃至纳米尺度，传统宏观传热理论逐渐失效，微观尺度下的热传导、热对流与热辐射表现出非经典特性。深入研究微纳米尺度下的热输运机制，有助于揭示能量输运的本质规律，为高效热管理、新型热电材料设计、纳米制造等提供理论支持与技术保障，对推动新一代微电子器件、能源系统与功能材料的发展具有重要的科学价值和应用前景。

Z-204

二维材料异质结器件的电子输运特性模拟

安义鹏

河南师范大学

二维材料因其独特的几何结构和丰富的物理性质，引起了广泛的研究兴趣。在当今后摩尔时代，硅基器件发展遇到瓶颈，而二维材料及其异质结结构因其超薄结构等优异特性在半导体器件领域具有重要潜在应用价值。本次报告主要介绍几个关于二维单层材料的电子输运性质理论研究工作。采用密度泛函理论结合非平衡格林函数方法，设计了基于 MA2Z4 单层超导体-半导体-超导体的异质结器件，并研究了其电子输运特性；另外研究了二维过渡金属卤化物 CrSCl 单层的自旋电子输运性质，设计了一些纳米器件模型，揭示了它们的功能特性；最后是关于 VS2/MoS2 侧面异质结的自旋电子输运性质研究工作，该异质结表现出较强的整流效应、自旋过滤效应、场效应和光电响应，在自旋电子器件方面具有潜在应用价值。

Z-205

二维体系中的界面效应及理论设计场效应晶体管器件

赵文凯*、单顺然、邹冬青、杨传路

鲁东大学

场效应晶体管是现代计算机处理器的基本构成单元，从 1960 年代以后，基于硅的晶体管一直在以摩尔定律的速度缩小尺寸。随着尺寸缩小到亚 10 nm 附近，传统的硅基晶体管已接近其物理极限，并面临短沟道效应、漏电流增加和不必要的功耗等问题。为了解决这些问题，寻找新型材料作为下一代沟道候选材

料迫在眉睫。二维半导体因其原子级别的均匀厚度、出色的栅极静电控制能力和无悬挂键结构是下一代场效应晶体管沟道材料的有力候选者。此外，n 型和 p 型金属氧化物半导体之间的不匹配极大地限制了互补逻辑电路中晶体管的发展。我们报道了一种五边形 CX₂ (其中 X = N、P、As、Sb) 场效应晶体管 (FET)，其在高性能 (HP) 和低功耗 (LP) 应用中均表现出出色的导通状态电流 (I_{on}) 性能。最大 I_{on} 值分别达到 4574 $\mu\text{A}/\mu\text{m}$ (HP) 和 1735 $\mu\text{A}/\mu\text{m}$ (LP)，显著优于大多数其他二维半导体材料。此外，该器件表现出理想的亚阈值摆幅，延迟时间和功耗符合 2023 年国际半导体发展路线图 (IRDS) 对 2025 年的标准，突显了该材料在未来的亚 5 纳米 FET 设备中的强大应用潜力。此外，还建立了载流子有效质量与 I_{on} 之间的关系，揭示了载流子有效质量各向异性对输运特性的影响：具有适当的态密度有效质量以及一定的有效质量差异率，能够确保高饱和电流，从而实现显著的导通状态电流。这项工作为高性能互补金属氧化物半导体场效应晶体管的设计提供了见解和设计指南。

Z-206

Symmetry-driven connectivity of phononic topological quasiparticles

Zhongjia Chen

South China Normal University

Phononic topological quasiparticles refer to degeneracy points in the phonon band structure of crystalline materials protected by symmetry, whose degeneracy and dispersion types are determined by local symmetries in the Brillouin zone and have been extensively studied. However, the global connectivity of topological quasiparticles across the entire Brillouin zone is often more complex, containing rich and insufficiently explored topological structures. In this work, we systematically establish a classification framework for Dirac phonons in centrosymmetric space groups, which is distinct from conventional definitions based solely on local symmetries, by fully considering the connectivity of phononic topological quasiparticles between different k-points based on compatibility relations in group theory. Furthermore, we focus on a class of "accidental degeneracies" along high-symmetry lines and conduct a comprehensive analysis of the connectivity of phononic topological quasiparticles across all 230 space groups, reclassifying them into four categories: (1) charge-0 Dirac points, (2) charge-2 Dirac points, (3) singly nodal-line-embedded degeneracies, and (4) doubly nodal-line-embedded degeneracies. First-principles calculations predict the existence of these topological connectivity structures in a range of real materials. This work broadens the classification perspective of phononic topological quasiparticles, emphasizes the fundamental role of global connectivity, and provides a new theoretical paradigm for the discovery and design of topological phononic materials.

Z-207

拓扑热电体系电子结构计算研究

王攀硕

郑州大学

热电材料可实现热能和电能直接转换，对降低能耗，实现“双碳”目标有重要意义，然而基于窄带半导体的传统热电材料转换效率进一步提升面临瓶颈。近期，通过对高迁移率的拓扑材料施加外磁场，观测到了横向和纵向大幅增强的热电效应，为热电调控提供了新的平台及途径。本报告将采用第一性原理计算结合有效模型的方法，系统研究磁性元素、外磁场、贝里曲率多因素协同效应，有效调控磁热电材料的电子结构并增强其热电性能。具体而言包括反常能斯特效应的能带逆向设计，拓扑半金属 Mg₃Bi₂ 体系及 GdTe₃ 体系的磁热电性能调控及电子结构研究。部分研究工作已发表在 AM、EES、npj CM 等国际顶级期刊。

Z-208

1H 相 Janus 型过渡金属硫族化合物单层稳定性的电子机理

黄维清

湖南大学物理与微电子科学学院

在材料科学前沿领域，1H 相 Janus 过渡金属硫族化合物 (JTMDs) 单层因其非对称结构诱导的独特电子特性，已成为自旋电子学和谷电子学等领域的关键材料体系。然而，受限于结构稳定机制的认知

空白，目前实验可合成的 JTMDs 体系极为有限。尽管晶格动力学稳定性判据已日趋完善，但关联材料本征特性的电子尺度稳定机制仍缺乏系统性理论框架。系统地建立电子结构与稳定性之间的关联，将为针对特定电子特性的材料设计开辟新途径。

基于键合特性与轨道分裂行为分析并结合配体场理论，我们揭示了 1H 相 JTMDs 单层结构稳定性的电子机理。通过多维度评估 84 种 1H 相 JTMDs 单层（覆盖 3 个周期、8 个副族的 14 种过渡金属原子，以及四种硫属元素（O、S、Se 和 Te））的结构稳定性，我们发现前（第 IVB~VIB 族）过渡金属基结构呈现族依赖的稳定性，而 VIIB~VIIIIB 族后过渡金属基结构绝大多数不稳定。深入分析表明：在前过渡金属基 JTMDs 结构中，离子键主导的反键态产生强 d 轨道排斥引发显著的轨道劈裂，从而通过库仑斥力维持结构稳定；而在后过渡金属基结构中，虽然共价键增强有助于稳定结构，但本征面外极化会显著削弱配体间的共价键强度，最终导致结构失稳。基于上述机理，我们提出了三种轨道分裂构型的稳定性分类准则，并通过引入卤素增强离子键合与自旋极化效应，成功设计出一系列具有本征铁谷特性的新型稳定二维 Janus 材料，填补了 JTMDs 体系中自旋极化分裂构型的理论空白。

这项工作首次建立了二维 JTMDs 结构稳定性与电子特性之间的内在联系。我们的研究证明，电子构型分析不仅能帮助预测材料的物理性质，还能作为评估其稳定性的有效工具。所揭示的电子构型-稳定性关联规律，为 1H 相 JTMDs 的实验合成与性能优化提供了重要的理论依据和设计指导。

Z-209

双层和三层 RP 相镍氧化物的非常规超导电性理论研究

路洪艳

曲阜师范大学

双层 Ruddlesden-Popper (RP) 相镍氧化物 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 在高压下实现了 80 K 的超导电性，成为继铜基超导体之后第二类液氮温区非常规超导体，引发了国际学术界的广泛关注。进一步的实验研究揭示了 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 中奇特的近直角三角形的超导转变温度-压力相图，与铜基和铁基超导体中的穹顶形相图明显不同。此外，研究表明三层 RP 相镍氧化物 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 也表现出超导性。解释双层镍基超导体的反常相图，并揭示双层和三层镍基超导体的超导机制是镍基超导研究中亟待解决的难点问题。基于此，我们结合第一性原理计算和奇异模泛函数重整化群方法对两个体系开展了系统研究。首先，研究了 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ 和 $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ 在高压下的电子结构，并构建了不同压力下的紧束缚模型和电子相互作用参数。随后，利用奇异模泛函数重整化群方法研究了其电子关联效应和非常规超导电性，揭示了高压下双层和三层镍基超导体的自旋涨落机制和 s±波配对对称性，并解释了前者奇特的超导-压力相图。值得强调的是，我们基于巡游电子图像的自旋涨落机制解释了双层镍基超导体的奇特超导-压力相图，这是从电子局域磁矩图像所不能得到的。该研究为深入理解镍氧化物超导体的超导机制提供了重要的见解，为最终确定镍基超导的微观机理指明了方向。以上工作发表在 Phys. Rev. Lett. 134, 076001 (2025) 和 Phys. Rev. B (Letter 形式) 109, L220506 (2024)。

Z-210

NbSe₂ 中两重对称性超导态的理论研究

司晨

Beihang University, China

单层 NbSe₂ 作为一种 Ising 超导体，已引起了广泛关注。实验上，其样品不可避免地存在缺陷，但这些缺陷对超导性的影响仍未得到充分研究。在本文中，我们揭示了单层 NbSe₂ 中最常见的缺陷——硒 (Se) 单空位——对超导性的显著影响。具体而言，Se 单空位破坏了理想单层 NbSe₂ 中的面外镜像对称性和 C_{3z} 旋转对称性，从而引入了非对称的自旋-轨道耦合 (SOC)。相比之下，理想单层 NbSe₂ 具有 Ising SOC，展现出各向同性的面内上临界场 (B_{c2})，而 Se 单空位引起的非对称 SOC 使得面内 B_{c2} 对面内磁场方向表现出各向异性的二重对称性。此外，Se 单空位显著降低了超导态的面内自旋磁化率，使得 B_{c2} 超过 Pauli 限的程度仅为中等水平，这与实验观测结果一致。这些发现为理解缺陷对二维材料超导性的调控作用提供了重要见解。

Z-211

二维材料中光诱导的拓扑物态与拓扑相变

郑宝兵¹、王锐^{*2}

1. 宝鸡文理学院

2. 重庆大学

周期光场驱动不仅可以作为低维量子材料物态调控的有效手段，还可以诱导出平衡态所不具有的新奇物理效应。本报告主要介绍通过光场诱导和调控二维材料的拓扑量子态。采用密度泛函理论和有效模型方法，结合 Floquet 理论和对称性分析，给出了光场诱导高阶拓扑绝缘体相变为高陈数量子反常霍尔绝缘体的理论方案，并且预言了实际材料石墨炔在光场的激发下转变为陈数连续可调的高陈数量子反常霍尔绝缘体。基于四带的 k - p 低能有效模型，采用基于密度泛函理论的紧束缚近似方法预言了过渡金属硫化物异质结材料中圆偏振光可以诱导谷极化的量子反常霍尔态，并且在 WS_2/WTe_2 异质结材料中实现了这一量子态。

主要参考文献：

Phys. Rev. B 109, 085148 (2024)

Phys. Rev. B 105, L081115 (Letter) (2022)

Phys. Rev. B 102, 201105 (2020)

Z-212

超导材料的高通量设计：稳定性与电声耦合的权衡策略

王仁海¹、郑锋²、张桢³、吴顺情⁴、董华锋¹、王才壮³、Vladimir Antropov³、孙阳^{*4}、Kai-Ming Ho³

1. 广东工业大学

2. 集美大学

3. 爱荷华州立大学

4. 厦门大学

本报告基于高通量计算与布里渊区中心点 (Γ 点) 快速筛选方法 (Phys. Rev. Mater. 2022)，系统探索多元超导材料中电声耦合强度 (λ) 与热力学稳定性的关联。研究发现：在三元金属二硼化物 (如 $MgNiB_4$, Phys. Rev. B 2025) 和立方 MH_6 八面体氢化物 (如 Mg_2IrH_6 , Mater. Today Phys. 2024) 中， Γ 点电声耦合强度 (λ_Γ) 与热力学稳定性 (能量凸包距离 E_d) 存在显著反相关性，其机理源于费米能级电子态密度峰值引发的声子软化；基于此提出“近不稳定区筛选”策略，成功预测常压下稳定的超导体 Li_3ZrB_8 ($T_c = 38$ K) 和立方氢化物 Li_2CuH_6 ($T_c = 80$ K)，并通过建立逾 500 种材料的稳定性-超导性图谱，揭示过渡金属 d 电子数对稳定性调控的关键作用，为多元超导材料的设计提供新方法。本工作证实权衡稳定性与电声耦合是突破现有超导瓶颈的关键策略，所发展的计算方法为实验探索突破麦克米兰极限的高性能超导体提供新途径。

Z-213

Structural ordering of amorphous motifs under electric field in threshold switching chalcogenides

Wenxiong Song

Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology

Threshold switching, the ensuing abrupt conductivity increase at a critical threshold voltage (V_{th}), makes amorphous chalcogenides appealing for crossbar memory applications, particularly for the recently developed selector-only memory. However, the unknown mechanism behind threshold switching hinders effective development of memories based on amorphous chalcogenides. Here, by combining device measurements and first-principles simulations, we identify an atomic-scale conductive filament (CF) region induced by electric polarization. The CF formation occurs as the polarization increases the material's dipole moments through the formation of preferred bond orientations under the electric field, resulting in significant structural changes in the CF region. The CF exhibits size-dependent characteristics and appears in various sub-10nm devices. The abrupt conductivity increase after switching on is contributed by delocalized electronic states confined to the CF, and the CF formation is responsible for the polarity-induced V_{th} shift in selector-only memory. These findings provide a conceptual foundation for maximising the potential of amorphous chalcogenides in novel crossbar memory technologies.

Z-214

异质原子掺杂构筑团簇基单分子器件的理论研究

裴玮^{*1}, 周思², 赵纪军²¹扬州大学物理科学与技术学院, 江苏扬州, 225009²华南师范大学物理学院, 广东广州, 510631

团簇作为介于原子、分子与宏观凝聚态之间的物质结构新层次, 是由几个乃至上千个原子、分子或离子通过物理或者化学结合力组成的相对稳定的微观聚集体。团簇具有确定的化学组分和原子结构, 表现出强的量子尺寸效应和类分子特性。其中, 配体保护的纳米核壳团簇具备类富勒烯团簇的超原子特性, 其电子结构、光捕获能力和激发态特性都明显地依赖于内核金属原子种类和团簇尺寸。近期, 我们以双膦基配体保护的 $M@Au_{12}$ 纳米核壳团簇为模型体系, 利用含时密度泛函理论系统性地探究了团簇光响应全过程。此外, 我们基于等电子替位掺杂方法, 将磁性原子(Fe、Cr、Mn)引入膦配体保护的 Au_9 纳米团簇(Au_9 NCs)核部, 构建 $M@Au_8$ 型掺杂团簇($M=Fe, Cr, Mn$)。 $M@Au_8$ 表现出显著的高-低自旋异构现象, 其电子顺磁共振、光吸收谱与电子输运特性均表现出显著的构效关系与自旋依赖性。这些理论计算结果为发展功能团簇开发提供了扎实的理论依据。

参考文献

[1] **Wei Pei***, Lei Hou, Jing Yang, Si Zhou*, Jijun Zhao*, *Nanoscale*, **16**, 14057 (2024)[2] Jie She, **Wei Pei**, Si Zhou, Jijun Zhao, *J. Phys. Chem. Lett.*, **13**, 5873 (2022)[3] Jing Yang, Jixiang Zhou, Xueke Yu, **Wei Pei***, Jijun Zhao, *Adv. Funct. Mater.*, 25070144 (2025)

Z-215

新型二维 Janus 结构光电特性高通量筛选及二维材料数据智能系统研发

于亚东*, 尚立峻, 杨勇丽, 代梦艳*

¹ 中国人民解放军军事科学院防化研究院, 北京, 102205, 中国

二维材料因具有独特的物理化学特性, 在光电子领域展现出巨大的应用潜力。然而, 光生电子-空穴对再复合、光吸收性能差、光电转化效率低等问题往往限制了其进一步发展和实际应用。为此, 本研究基于第一性原理高通量计算, 对 MA_2Z_4 型二维材料及其 Janus 结构进行系统设计与筛选, 基于稳定性、电子结构、光电功能特性等描述符, 从 720 个候选结构中筛选出 10 个具有高光伏转换效率(PCE)的结构和 4 个具有光催化析氢反应活性(HER)的候选结构。本研究还阐明了通过构建非对称 Janus 结构引入内建电场对 MA_2Z_4 材料物化性质的影响规律及其调控机制, 为新型 Janus 结构的设计及其在光电子和光催化领域的应用提供关键候选材料。此外, 针对二维材料数据高维、多源、异构等特点, 本研究开发了基于大模型 LoRA 微调技术的 PDF 文献数据自动采集提取、结构化、入库的数据智能结构化和交互系统, 实现“文献数据-结构化数据-二维材料数据库”全流程自动化和智能化; 针对数据库中的数据, 创新提出了基于多基础模型优化的堆叠机器学习模型, 可实现仅根据元素基本属性精准预测其功函数和带隙能物理化学特性, 极大提高了预测精度和研发效率。本研究为二维材料的高效筛选和预测奠定了理论和技术基础。

关键词:

二维 Janus 结构; 高通量计算; 二维材料数据库; 数据智能结构化和交互系统

参考文献:

1. YL Yang, YD Yu et al., *J. Mater. Chem. A*, 2024, 12, 33233.2. LJ Shang, YD Yu et al., *J. Mater. Inf.*, Minor Revision.

Z-216

SUS2-MLIP: 融合全局物理标度的超线性小参数机器学习原子间势函数

胡晏箫

南方科技大学

利用机器学习方法构建原子间相互作用的势能面(PES)已成为材料设计与模拟领域的重要手段。然而, 现有的机器学习原子间势(MLIP)模型通常缺乏全局物理约束, 这导致其在域外预测方面存在本质性挑战。受通用状态方程(UEOS)的启发, 本研究提出了一种具有超线性表达能力的小参数 MLIP 模型——SUS2-MLIP。通过引入全局物理标度, 该模型不仅显著减少了参数量, 还从根本上增强了模型的泛化能力和物理可扩展性。基准测试和物性模拟的结果表明, 在参数量低两到三个数量级的情况下, SUS2-MLIP 的预测准确度仍能与更复杂的模型媲美。这种显著的参数效率使得在普通计算资源上进行超大规模模拟成为可能。该研究展示了将自上而下的物理约束与自下而上的机器学习相结合开发更强大、更易

解释且更具扩展性的计算工具的潜力，为基于物理信息的 MLIP 模型设计提供了全新的视角。

Z-217

机器学习驱动的材料模拟方法发展与应用

王俊杰、孙建*

南京大学

机器学习力场可以以更低的计算成本获得第一性计算级别的精度，因此在材料模拟领域有着广泛的应用，并越来越受到人们的关注。例如，使用神经进化势能（NEP）和 GPUMD 代码，现在已经可以实现单张 GPU 上对百万个原子的系统进行纳米尺度时间尺度的模拟。借助这种方法，我们对极端条件下物质的冲击压缩进行了模拟，包括 C 的金刚石-BC8 相变路径与 SiO₂ 的斯石英-黄铁矿相变路径。另外，我们还将介绍我们团队开发的高阶笛卡尔张量消息传递网络（HotPP）与机器学习和图论辅助的晶体结构预测方法（MAGUS），以及我们在该方法应用于预测新化合物方面的一些最新进展。

Z-218

Non-Redundant Atomic Environment Sampling through Covering Set Optimization

黄晶

南方科技大学

机器学习原子间势（MLIPs）通过融合机器学习算法与第一性原理数据，实现了对势能面的高效参数化重构，为多尺度材料模拟提供了强大工具。然而，传统主动学习方法（如基于委员会查询或结构描述符的策略）存在计算效率低、构型空间覆盖评估不严谨等问题。本研究提出了一种基于 SUS2-MLIP(Super-Linear Machine Learning Interatomic Potentials with Physics-Informed Universal Scaling and Ultra-Small Parameterization)的原子环境编码（AEE）的数据蒸馏策略——覆盖集优化驱动的原子环境采样（CSO-AES），其核心创新包括：1. 高分辨率原子环境识别：通过 MLIP 框架中的 AEE 描述符，将构型空间分解为原子级环境特征，结合主成分分析（PCA）实现环境差异的可视化（如 TiC 体系中不同相结构的原子环境区分）。2. 双层主动学习框架：内循环：采用自适应分箱（Freedman-Diaconis 准则）和贪心算法筛选最小覆盖集，确保 99.9% 以上的原子环境覆盖率。外循环：通过温度梯度扫描（50–1000 K）系统覆盖热力学相空间，显著减少数据冗余。在 Na₃PS₄ 固态电解质例子中，CSO-AES 仅需 397 个构型即可准确预测相变（500 K 立方相变、850 K 正交相变）、钠离子扩散系数的模拟与 AIMD 结果吻合以及热导率与实验结果一致，其力场误差与 DP-GEN（1285 构型）和 DAS（554 构型）相当。未来工作将扩展至界面体系与多元组分材料的高效采样。相关代码已开源（<https://github.com/hu-yanxiao/CSO-AES>）。

Z-219

银金属中的同素异构现象：寻找六方相、结构确定 以及热力学稳定性的判定

曹慧

天津大学

现有物理学表明，与 Fe 和 Ti 这样的金属不同，纯 Ag 是面心立方结构，没有微结构的演变。在这项研究中，我们提出了一种独特的方法来寻找和确认 Ag 中的六方结构，包括快速冷却和 TEM 表征，并确认纯 Ag 经历了从面心立方（FCC）的晶体结构到密排六方相（HCP）晶体的同素异形体过渡，温度转变区间是 400°C 到 500°C。此外，使用非平衡分子动力学（MD）和 GIBBS2 计算了在 300 K 至 900 K 的温度范围内，银的面心立方和六方相晶体结构的吉布斯自由能。计算结果表明，Ag 的 FCC 和 HCP 阶段之间的 Gibbs 自由能差很小。鉴于此，在本研究中还计算了声子谱，以阐明动力学转化机制，进一步证明了结构转化的发生。最后，结果表明，Ag 在高温下获得的密排六方相可以保留到室温，这意味着获得大量六方相是可行的。例如，可以通过控制冷却速率来改变 Ag 金属的物理和机械性能。

Z-220

Atomistic Simulations of Atomic Layer Deposition Processes

Linwang Wang

Institute of Semiconductor, CAS

I will present our work in using ab initio calculations and kinetic Monte Carlo methods to simulate the atomic layer deposition (ALD). In particular, we have used the on the lattice kinetic Monte Carlo and off lattice

kinetic Monte Carlo approaches. One of the key point is to find the surface attachment configurations and chemical reaction paths. The chemical reaction paths are found using a nanoreactor technology, and its reaction barrier high is calculated using a slow growth method. Machine learning force fields are also developed to accelerated many of the calculations, especially for some high aspect ratio hole depositions process. I will also present some results for our physical vapor deposition simulations.

Z-221

K-Rb 二元合金中的连续液-液相变与电负性反转机制

宗洪祥*、韩晨旭、丁向东

西安交通大学

液-液相变 (LLPTs) 通常被视为两态系统, 即两种不同液相之间通过局部结构重排发生转变。然而, 本研究在 K-Rb 二元合金中观察到一种连续性的 LLPT 过程, 伴随电负性反转, 表现出独特的三态系统行为。该转变由压力诱导的轨道能级重排驱动, 经历了从 s-金属到电子化合物再到 d-金属的演化过程, 并伴随着价态反转: 钾由负价跃迁为正价, 而铷则发生相反变化。整个转变过程中, 合金在光学、热力学和动力学性质上表现出两个连续的异常点, 横跨较宽的压力范围。此外, 我们还发现此类机制在碱金属和碱土金属液体中普遍存在。该现象的发现不仅揭示了碱金属液体中电子结构主导的复杂相变机制, 也为深入理解连续性相变提供了新的视角。

Z-222

地球早期演化关键相变过程的先进分子动力学模拟研究

牛海洋*、张仕威、胡俊伟、余耀辰

西北工业大学

地球如何从早期的形态逐步演化出适宜生命生存的环境, 是地球与行星科学领域最重要的科学问题之一。地球早期经历了碰撞熔融、核幔分异, 以及岩浆洋结晶等剧烈相变过程, 形成了包括地核、地幔、地壳以及大气在内的原始圈层结构。研究上述相变过程是理解地球物质组成与演化历程的关键所在。受限于空间和时间分辨率, 现有的实验手段难以在原子尺度下动态观察研究材料的相变过程和相变界面的结构演化规律。原子尺度下的计算机模拟为研究材料的相变过程提供了有效手段, 然而材料的相变过程的模拟需要至少上千原子量级、数十微秒的高精度计算, 远远超过了第一性原理分子动力学能够达到的时空尺度。这一时空尺度难题又反过来阻碍了人们对材料相变机理的系统理解。因此, 实现效率与精度兼顾的第一性原理精度分子动力学模拟显得尤为重要。本报告针对以上问题, 采用机器学习分子动力学等方法解决了材料相变的原子尺度模拟的时间尺度难题, 进而对核幔分异和岩浆海洋结晶过程进行了系统的原子尺度模拟研究。

Z-223

相变信息存储材料的结构转变机制模拟与物性设计

陈念科

吉林大学

基于材料结构转变的相变信息存储技术具有速度快、可微缩、光/电存储通用等优点, 因而被认为是最具潜力的新型电/光存储芯片技术之一。相变存储材料的优化设计需要理解器件工作过程中材料的结构物性转变机制。报告将探讨几种相变信息存储器中关键材料结构/性质转变机制及面向低功耗存储的相变新原理和新设计: (1) 使用基于机器学习势的分子动力学模拟揭示超晶格相变半导体独特的熔化动力学机制 [1], 为设计新型低功耗器件提供理论参考; (2) 揭示出 3D-Xpoint 相变存储芯片中阈值选通材料中的热致开关新机制[2]; (3) 揭示新型信息存储半导体二维 In_2Se_3 中极化-缺陷耦合机制并据此设计新型存储方案[3], 以及通过微弱结构变化诱导显著光电性质转变的电荷密度波设计等[4-6]。上述探索为低功耗、高密度信息存储技术的开发提供有益参考建议。

[1] N.-K. Chen* et al., Acta Mater. 276, 120123 (2024).

[2] N.-K. Chen et al. Adv. Funt. Mater. 34, 2410622 (2024).

[3] N.-K. Chen* et al. Nano Lett. 25, 3726 (2025).

[4] N.-K. Chen* et al., Nature Commun. 15, 9983 (2024).

[5] N.-K. Chen# et al., Appl. Phys. Rev. 120, 185701 (2021).

[6] N.-K. Chen et al. Phys. Rev. Lett. 120, 185701 (2018).

Z-224

相变搜索方法及其在铅基铁电中的应用

胡奇

北京航空航天大学

本报告提出基于群论的相变路径搜索方法，通过构建初始相与终相的公共超群，系统分解对称性操作生成所有可能的原子映射路径，并利用平移/旋转变换消除等效路径，实现相变空间的全覆盖。相变方法在铅基氧化物中揭示了：正交相的多种极化切换路径，及其对应的中间路径结构，菱方相虽静态稳定，但动态切换时因高内应力自发退化为正交相或四方相。研究证实相变中间态（如 tI 、 tII ）的对称性约束规律，为理解极化翻转、唤醒效应及多晶 HfO_2 薄膜的应力调控提供了普适性分析框架。

Z-225

亚氧化钛超快可逆固固相变机制研究

刘鸣凤、刘培涛*、陈星秋

中国科学院金属研究所

Reconstructive phase transitions involving breaking and reconstruction of primary chemical bonds are ubiquitous and important for many technological applications. In contrast to displacive phase transitions, the dynamics of reconstructive phase transitions are usually slow due to the large energy barrier. Nevertheless, the reconstructive phase transformation from β - to λ - Ti_3O_5 exhibits an ultrafast and reversible behavior. Despite extensive studies, the underlying microscopic mechanism remains unclear. Here, we discover a kinetically favorable in-plane nucleated layer-by-layer transformation mechanism through metadynamics and large-scale molecular dynamics simulations. This is enabled by developing an efficient machine learning potential with near first-principles accuracy through an on-the-fly active learning method and an advanced sampling technique. Our results reveal that the β - λ phase transformation initiates with the formation of two-dimensional nuclei in the ab-plane and then proceeds layer-by-layer through a multistep barrier-lowering kinetic process via intermediate metastable phases. Our work not only provides important insight into the ultrafast and reversible nature of the β - λ transition, but also presents useful strategies and methods for tackling other complex structural phase transitions.

Z-226

分子动力学在新能源材料研究中的应用

孙宜阳

中国科学院上海硅酸盐研究所

Email: yysun@mail.sic.ac.cn

高温相的固体通常仅在动力学上是稳定的，或者说这些相在 0K 下不具有稳定的声子谱。采用静态第一性原理计算研究这类材料的体相和缺陷性质时具有不确定性。以立方钙钛矿 $CsPbI_3$ 为例，我们发现这种 0K 不稳定性会导致缺陷超胞的结构随机化，从而使超胞的计算结果受到远离缺陷的区域里结构畸变的影响。以立方相 Cu_2Te 为例，我们发现 Cu 离子在高温下的扩散同样导致类似的问题。我们提出了基于分子动力学方法，通过系综平均来解决这一问题。采用该方法我们还发现了自旋轨道耦合效应对禁带宽度的修正随温度升高而减小的现象。

Z-227

W/Fe 界面位错网络结构及对位移级联和力学性能影响的分子动力学模拟研究

高宁*、董怡斌

山东大学

聚变堆中面向等离子体 W 材料与其支撑的铁基结构材料之间形成 W/Fe 界面，其在服役过程中持续受到高能中子的轰击，不仅影响其界面结构演化而且影响其力学服役性能，因此，研究 W/Fe 界面抗辐照性能具有重要的科学和工程意义。针对此问题，在本研究中，通过构建不同的 W/Fe 界面结构，开展大规模位移级联模拟，发现了相对于其他界面，W(100)/Fe(100)及 W(110)/Fe(110)界面结构呈现出规则方形或不规

则六边形的位错网络结构, 这些结构在位移级联过程中表现出不同的动力学演化方式, 对级联形成的辐照缺陷具有强烈的吸收捕获导致界面恢复的能力, 特别是 W(100)/Fe(100)具有较强的抗拉伸和剪切的力学性质。对底层的物理机制分析发现, 这种规则的方形结构导致界面在外力影响下原子位移大小呈现波浪分布, 并且发现了界面处的滑移系统启动和演化的新机制, 解释了计算模拟结果。基于这些结果, 我们进一步研究了 W/Fe 作为磁存储系统在辐照损伤后的磁性变化, 基于第一性原理计算结果, 发现了界面处缺陷演化导致系统磁各向异性性能是缺陷性质的函数, 说明在用于磁存储系统中时, 需要相应的辐射防护。这些研究结果, 为 W/Fe 在核聚变的应用及辐照环境下磁存储系统的开发和应用提供了重要科学参考。

Z-228

多孔碳纳米限域下的离子传输机理恒电势分子模拟研究

莫唐明

广西大学

多孔电极材料能有效提高超级电容器能量密度, 然而常以牺牲功率密度为代价。对多孔电极超级电容器离子传输机理深入研究, 是设计兼具高能量高功率密度超级电容器的理论基础。作者开发并采用恒电势分子动力学模拟研究了多孔电极超级电容器的充电机理, 发现了不同于已有研究的新现象: 多孔电极的充电速度随孔径震荡变化, 孔径为离子直径半整数倍时充电反常加快, 兼具高能量高功率, 并阐明充电速度加快的内在机理为离子的过渡态分布; 研究了多孔电极入口效应对离子传输的影响规律, 从而设计了一种具有喇叭形状入口的多孔电极新结构, 可同时提升超级电容器充电速度与电荷储存, 阐明充电速度提升归因于逐步脱溶剂化过程与分离的阴阳离子传输路径。作者以有序石墨炔为例, 结合分子动力学模拟、平均场理论与跨尺度模型探究了有序多孔电极的拓扑结构和金属性对超级电容器充电与储能性能的影响机理。分子动力学模拟与平均场理论揭示多孔石墨炔电极孔内离子的静电相互作用由反比例衰减转变为指数衰减, 呈现超离子态结构。电极表面粗糙的 AB 堆叠结构相对于 AA 堆叠结构孔内静电相互作用衰减更快, 超离子态更强, 破坏了库伦有序结构, 有利于离子的分离与传输, 提升了电极的双电层电容; 同时孔内自由离子比例增加, 降低了离子的传输电阻, 加快了系统的充电速度。发展了跨尺度模型, 将分子模拟结果放大至宏观尺度, 揭示新预测的电极材料可兼具高能量密度与高功率密度。作者工作深化了对多孔电极离子传输机理的认知, 为设计高能量高功率的超级电容器提供了理论基础与可行方案。

作者相关文章:

[1]Tangming Mo; Zhenxiang Wang; Liang Zeng; Ming Chen; Mingcai Zhang; Yong-Qing Zhao; Guang Feng*, Energy Storage Mechanism in Supercapacitors with Porous Graphdiynes: Effects of pore topology and electrode metallicity, Advanced Materials 2023,doi/10.1002/adma.202301118

[2]Qin Kang, Hongyu Liang*, Zhaomin Zhu, Fuxu Xing, Bingzheng Zhu, Yuman Li, Shihao Wang, Shengda Tang, Hui Li, Li Pan, Lijun Yang, Tangming Mo*, Yongfeng Bu*, Non-Substituted Aromatic Pyridine N-Oxide Additives with an Intrinsic N→O Acceptor for Ultra-Long-Life Zn||MnO₂ Batteries, Angewandte Chemie International Edition 2025,doi.org/10.1002/anie.202420183

[3]Tangming Mo; Jiaying Peng; Wenlei Dai; Ming Chen; Volker Presser; Guang Feng*, Horn-like pore entrance boosts charging dynamics and charge storage of nanoporous supercapacitors. ACS Nano 2023, doi/10.1021/acsnano.3c03886

[4]Tangming Mo; Sheng Bi; Yuan Zhang; Volker Presser; Xuehang Wang; Yury Gogotsi; Guang Feng*, Ion structure transition enhances charging dynamics in subnanometer pores. ACS Nano 2020, 14 (2), 2395-2403.

Z-229

不同能量 PKA 对 ODS 钢中 Ar 泡溶解的分子动力学模拟

李建洋*、韩旭孝、张崇宏

近代物理研究所

不同离子对材料的辐照会产生不同的初级撞出原子能谱 (PKA)。一方面, PKA 能量会导致不同的级联缺陷团簇分布, 可能影响辐照缺陷的长期演化; 另一方面, PKA 能量也会对已有的溶质或缺陷团簇产生级联溶解效应, 溶解程度可能因 PKA 能量和缺陷团簇的类型而存在差异。本研究利用分子动力学模拟, 研究了在不同 PKA 能量 (30-100 keV) 下, FeCrAl-ODS 钢模型合金中附着在氧化物颗粒上的 Ar 气泡

的溶解过程。结果表明,随着 PKA 能量和级联次数的增加,直径在 2 nm 至 4 nm 之间的氙气泡会发生明显的溶解,而氧化物颗粒界面不足以约束 PKA 对 Ar 泡的级联溶解过程。在多重级联叠加的情况下,氙气泡出现沿着 PKA 运动方向漂移的特征。SRIM 模拟计算显示,当用能量为 307 MeV 的 Xe 离子辐照 FeCrAl 合金时,在辐照损伤峰值区域会产生更高的 PKA 能谱和更多的级联次数,从而导致损伤峰值区域更明显的级联溶解效应。计算模拟结果与离子束辐照 FeCrAl-ODS 钢样品的微结构分析数据对应良好。这些模拟结果揭示了离子辐照过程中级联溶解随 PKA 能量和级联次数的变化规律,为理解不同离子和中子辐照实验中的微观结构差异、优化离子束辐照模拟中子辐照实验方案提供了一定的科学参考。

Z-230

通过高通量分子动力学模拟和机器学习优化脱盐膜分离性能

曹金吉、魏明杰*

南京工业大学

反渗透(RO)膜的孔径和亲水性对渗透率的影响引起了广泛关注。然而,由于这两种因素相互作用,其影响往往难以明确识别。本研究采用高通量分子动力学(HTMD)模拟和碳纳米管(CNT)技术,得到了大量渗透率和 NaCl 截留率的数据。随后,利用机器学习(ML)方法对这些数据进行分析,以优化脱盐性能。

HTMD 结果表明,压力对渗透率的影响不显著。此外,增大孔径和降低亲水性会提高渗透率,但随之 NaCl 的截留率也会降低。本研究还揭示了孔径与亲水性之间的相互干扰效应,并从分子层面阐明了相关机制。同时,利用机器学习对这些渗透率和 NaCl 截留率数据进行分析预测,从而找到实现最高渗透率和 100% NaCl 截留率的最佳条件,再通过分子动力学模拟进行验证。本研究表明,HTMD 与机器学习的结合为设计新型 RO 膜以实现更佳性能展现了良好的前景。

Z-231

Wetting Study of In and Sn Solders on AlSc Target and Cu Backboard Materials based on Molecular Dynamics and First-principles Calculation

Xiaofei Zhang,Xiaofeng Zhang,Xvdong Hou,Zicheng Zhou,Xiaochao Wu,Bingbo Niu,Jiaqiang Yang*,Chengduo Wang,Qingkui Li,Jilin He
Zhengzhou university

In the domain of 5G communication technology, AlScN film is an ideal piezoelectric material for filters owing to its superior performance. Therefore, ensuring the stability of the brazing between the AlSc target and the Cu backplane during the sputtering coating process is crucial for the production of high-performance AlScN films. This study aims to compare the wetting behaviors of In and Sn, two commonly used semiconductor target solders, on the (100), (110), and (111) surfaces of Cu and AlSc using the molecular dynamics and first-principles method. The research findings reveal that, in comparison with Sn, In displays superior wetting performance, this can be ascribed to the stronger adhesion energies and greater electron transfer at the In/Cu and In/AlSc interfaces. In particular, In displays the ideal wettability on the (111) surface of Cu and AlSc, and the spreading mechanism of In on Cu and AlSc follows the diffusion-limited model. Additionally, size effects on the wettability of nanoparticles with radius of 37.5 Å and 50 Å can be considered negligible. The study provides theoretical support for the solder design and development of AlSc targets for filters in 5G technology.

Z-232

氢在钨表面扩散行为的分子动力学研究

康腾、崔节超*

四川大学

面向金属等离子体的组件中的氢保留是未来聚变装置的关键问题之一。对于在 ITER 中被选为分流器材料的钨,在聚变堆的极端环境下如高能氢同位素等离子体轰击、14 MeV 中子辐照等,氢(H)在钨中的吸附、扩散与滞留行为会显著影响材料的力学性能与燃料循环效率。因此,在本文中,我们使用分子动力学模拟来研究钨表面氢的扩散行为,以分析氢的吸附态、不同覆盖度下氢的扩散、氢复合成分子以及氢在钨表面上的聚集。根据 MD 模拟结果讨论了氢在钨表面吸附位点、吸附能,并使用 MSD 方法研究了 H

在 W (110)表面的扩散行为,揭示了不同覆盖度对于 H 在 W (110)表面的扩散、分布、脱附以及渗入的影响。研究表明,在 500-1000 K 温度区间内,不同覆盖度(single H、 $\theta=0.05-0.15$ ML)体系中 H 的扩散严格遵循 Arrhenius 方程。扩散的活化能差异幅度小于 5% ($<0.01\text{eV}$),但指前因子 D_0 随覆盖度增加呈现出系统性衰减趋势,表明覆盖度变化主要影响扩散过程的熵变项,而非势垒本身的焓值改变。其次,在三种覆盖度 ($\theta=0.05-0.15$ ML) 下 H 原子在 W(110)表面都呈现出长程有序排列。RDF 显示在 $r=2.5-3.8$ Å 区间出现了显著抑制,证明了在近程存在强排斥势,而在 $r=3.8-5.0$ Å 区间内,RDF 峰强较理想分布有显著提升,揭示了中等程存在吸引作用,同时中程吸引作用主导了脱附前驱态的形成。

Z-233

高压下富氢化合物的结构及超导性质研究

段德芳

吉林大学

近年来,高压下富氢超导材料研究取得了重要突破,H₃S、LaH₁₀ 和 CaH₆ 等富氢化合物在高压下(>150 GPa)展现出 200 K 以上的超导转变温度,但是这些材料合成压力高,很难截获到低压和常压条件,大大限制了其应用研究。针对这一领域"降低稳定压力"和"提升超导温度"两大科学问题,本研究通过第一性原理计算与晶体结构搜索技术相结合,系统探索了新型氢基超导材料的设计与优化。针对第一个科学问题,提出了"预压缩"氢合金骨架理论,设计了系列类萤石结构的氢合金骨架超导体,尤其 LaBeH₈ 的动力学稳定压力降至 20 GPa,同时理论超导温度高达 185 K,已经被实验证实。针对第二个科学问题,构建了笼型氢化物预测超导转变温度的 AE 模型,结合自建数据库,在大体系三元笼型氢化物中筛选出了若干兼备热力学稳定性和室温超导电性的氢化物,如 Fd-3m-Li₂NaH₁₇ 在 220 GPa 的超导温度为 357 K。这些研究成果不仅深化了对高压氢化物超导机制的认识,也为实现实用化室温超导材料提供了新的理论指导和材料体系。

Z-234

压力诱导液态氢化锂的结构转变及热力性质的异常

颜小珍*、陈杨梅、耿华运

江西理工大学

理解液体结构及其在不同压力下的演化机制是凝聚物理与材料科学领域的重要挑战。本研究通过第一性原理分子动力学模拟,揭示了液态氢化锂(LiH)在宽压强(0-500GPa)范围内发生的压力诱导结构转变现象。该行为可描述为从低压下具有 Li⁺-H⁻对偶对称性的液态,连续过渡到高压下对称性破缺的液态。同时,体系的热力学量(如摩尔热容)和离子输运性质(如扩散系数)均呈现显著响应。值得注意的是,这种现象属首次在离子液体中发现,而此类材料广泛存在于宇宙天体及工业应用中。通过构建 LiH 的高压-高温相图,揭示了这一曾被视作简单离子化合物的体系中所蕴含的丰富物理机制。

Z-235

压力下液态金属铋的线性行为规则和热力学属性

厉华明

太原理工大学

本研究通过从已有的实验数据和幂功率状态方程计算的热力学数据,首次在液态铋中发现高压下的非线性等温规则,验证了压缩因子相关量与体积对数在宽温压范围内的线性关系,并基于此提出线性规则状态方程,解析推导了熵、内能、等压热容等十余项热力学参数。研究表明,实验与理论计算的约化体积模量和内压参数在高压等温线上均呈现显著线性特征,但实验值在极高压下会出现偏离;等压热容在特定压力下存在极小值,内能曲线也呈现明显的极小值特征;绝热体积模量和体声速随压力线性增加。该工作不仅揭示了液态铋在高压下的独特热力学行为,还为极端条件下液态金属的热力学建模提供了新方法,对能源材料的设计和开发具有重要的理论指导意义。

Z-236

Interlaced Nanotwinned Diamond and Its Deformation Mechanism under Pure Shear Strain

Yabei Wu¹, Mingqiang Zhang^{1,2}, Wenqing Zhang^{*1}

1. 南方科技大学

2. 华东师范大学

While there is a relatively clear understanding of the deformation mechanisms of parallel nanotwinned diamonds with a single-orientated twin plane under shear strain from both experimental and theoretical studies, significant discrepancies remain between single-orientated parallel twins and experimentally observed twinned structures. These discrepancies hinder a comprehensive explanation of the structural evolution and deformation mechanisms in real twinned diamonds. To address this gap, we constructed an interlaced nanotwinned diamond structure with coexisting twins of different orientations and investigated its deformation mechanisms under pure shear strain. The interlaced twins with different orientations inevitably lead to the coexistence of sp^3 bonds and sp^2 line defects at the intersecting sites. Our findings reveal that under shear strain, the ideal twin interfaces in the interlaced nanotwinned diamond structure first undergo flip, transforming into a defective parallel nanotwinned diamond structure. As shear strain increases, this defective structure evolves into a unique diamond/graphite interface structure. Due to the strong local carbon bonds associated with sp^2 defects, graphitization lags behind that of sp^3 carbon bonds, leading to the formation of pentagonal ring structures at the interface. This imparts edge dislocation characteristics to the interface structure, which is significantly different from the diamond/graphite interfaces observed in high-temperature and high-pressure experiments on graphite. Calculations further indicate that continued increase in shear strain may lead to a series of transformations among diamond/graphite interface structures, defective diamond structures, and back to diamond/graphite interface structures. This study provides important insights into the deformation mechanisms of interlaced nanotwinned diamonds under extreme conditions and reveals a new type of diamond/graphite interface structure.

Reference

1. Mingqiang Zhang, **Yabei Wu***, Ye Sheng, Jing Huang, Yanxiao Hu, Xuezhi Ke*, Wenqing Zhang*, Interlaced Nanotwinned Diamond and Its Deformation Mechanism under Pure Shear Strain. *Materials Today Physics* 52, 101685 (2025)

Z-237

高压锂基电子化合物结构与物性的理论研究

张孝华、杨国春*

燕山大学

电子化合物是一种部分价电子脱离原子轨道而局域在晶格间隙的量子材料，具有间隙电子电荷浓度和拓扑形态密切相关的材料性质，受到化学、物理和材料等领域广泛关注。电子化合物超导体作为一种新型超导材料，其非同寻常的电荷转移与间隙电子相关的超导电性对于加深经典化学认知和拓展电声耦合机制具有重要研究意义。

聚焦探寻新型电子化合物超导体，我们在借助电负性适中 p 区元素强的电荷调控能力调制高压下锂(Li)电子分布预测了系列富 Li 组分电子化合物超导体。其中，间隙电子与 p 区原子核外电子连通的 Li_6P [1]和 Li_6As [2]等均表现出超过 McMillan 极限的高温超导电性，揭示了间隙电子与原子核外电子强耦合贡献超导电性的独特机理。基于 Li 的简单立方单元，我们采用 Au 面心立方框架约束和 H 原子填充两种方法在高压下设计了不同结构的高对称性立方 Li 基电子化合物 Li_8Au [3]和 Li_8Hn ($n = 7-4$)[4]，将电子化合物超导转变温度进一步提升至液氮沸点附近；通过探究间隙电子电荷量对超导电性的影响，建立了间隙电子与 Li 原子相互作用，增强电声耦合，贡献超导电性的重要关系。我们的工作为电子化合物超导电性研究提供了重要见解，有力促进了电子化合物超导体的发展。

参考文献：

[1] Zhao, Z.; Zhang, S.; Yu, T.; Xu, H.; Bergara, A.; Yang, G. *Phys. Rev. Lett.* 2019, 122, 097002.

[2] Zhao, Y.; Bergara, A.; Zhang, X.; Li, F.; Liu, Y.; Yang, G. *Phys. Rev. B* 2023, 108, 104505.

[3] Zhang, X.; Yao, Y.; Ding, S.; Bergara, A.; Li, F.; Liu, Y.; Zhou, X.-F.; Yang, G. *Phys. Rev. B* 2023, 107, L100501.

[4] Guo, Z.; Bergara, A.; Zhang, X.; Li, X.; Ding, S.; Yang, G. *Phys. Rev. B* 2024, 109, 134505.

Z-238

有机纳米系统电子结构与物性研究

伍琳璐¹、季威^{*2}

1. 辽宁材料实验室

2. 中国人民大学

有机纳米系统因其易于制备且灵活可调等特点,在柔性电子、光电子、催化等领域有广阔的应用前景。理解有机纳米体系的分子间、分子与衬底间相互作用对设计和构筑功能有机纳米系统具有重要的意义。对于有机分子单晶体系,本工作结合密度泛函理论(DFT)计算和拉曼、电输运测量等手段研究了一类具有高迁移率的有机分子晶体,揭示了其分子层间范德华相互作用对分子间纵向振动的抑制导致的电输运性质提升。对于表面构筑的有机分子系统,研究结合理论计算和扫描隧道显微术与扫描隧道谱学(STM/STS)等实验手段,揭示了其电子结构和潜在的催化应用。该研究为充分理解有机纳米系统电子结构和功能设计提供了重要启发。

Z-239

K-Rb 二元合金中的连续液-液相变与电负性反转机制

宗洪祥*、韩晨旭、丁向东

西安交通大学

液-液相变(LLPTs)通常被视为两态系统,即两种不同液相之间通过局部结构重排发生转变。然而,本研究在 K-Rb 二元合金中观察到一种连续性的 LLPT 过程,伴随电负性反转,表现出独特的三态系统行为。该转变由压力诱导的轨道能级重排驱动,经历了从 s-金属到电子化合物再到 d-金属的演化过程,并伴随着价态反转:钾由负价跃迁为正价,而铷则发生相反变化。整个转变过程中,合金在光学、热力学和动力学性质上表现出两个连续的异常点,横跨较宽的压力范围。此外,我们还发现此类机制在碱金属和碱土金属液体中普遍存在。该现象的发现不仅揭示了碱金属液体中电子结构主导的复杂相变机制,也为深入理解连续性相变提供了新的视角。

Z-240

共价有机框架材料中溶剂分子传质机理的模拟研究

李树楷、魏明杰*

南京工业大学

低能耗的有机溶剂分离对于石油化工行业非常重要。而共价有机框架(COF)膜在快速分离有机溶剂方面有巨大前景。因此探究溶剂在混合后的传质机理对设计分离膜至关重要。本文通过分子动力学模拟研究了甲醇、乙醇和丙酮等三种纯溶剂及它们的混合体系在 COF 膜上的分离行为。研究发现,尽管理想选择性较高,实际选择性却接近于 1,主要由孔内传质效应引起,特别是乙醇在混合溶剂体系中的流速显著提高。之后从优先吸附的角度和传质性质变化的角度探究溶剂混合后的机理,通过密度分布发现甲醇和丙酮未表现出优先吸附的趋势。通过计算 MSD 发现溶剂混合后溶剂间的相互作用会导致流变性质发生改变,揭示了溶剂间的相互作用是影响分离性能不容忽视的影响因素,为优化溶剂分离膜设计提供了理论指导。

Z-241

超离子冰的晶格动力学研究

董校

南开大学

随着高压下的超离子冰被高压实验证实,超离子冰的物性研究成为了研究热点。我们课题组基于第一性原理和机器学习分子动力学,对超离子冰的物理性质进行了系统性研究。最新成果有:1)超离子冰在电场、高压和高温的共同作用下,会出现一系列与单独场作用完全不同的行为,基于这种行为我们提出了行星条件下除行星发电机模型外的一种新的磁场产生模式;2)传统超离子冰的研究往往基于其游离的质子部分,我们基于机器学习大时空尺度分子动力学,给出了超离子冰的声子谱,并研究了其中的声子软化现象和声子寿命变化,将声子这一近百年的物理概念拓展至超离子态。

Z-242

软物质手性自组装机制

李占伟

郑州大学化学学院, 郑州, 450001

手性在揭示生命起源之谜与设计先进功能材料中扮演着至关重要的角色。然而,多层次自组装过程中的手性传递规律及动力学机制尚未清晰。软物质体系(包括胶体、液晶、聚合物、超分子等)不仅是探究手性起源的理想模型体系,也是构筑手性功能材料的重要组装基元。为了揭示软物质手性自组装的本质和规律,我们发展了一系列新型补丁粒子和补丁粒子链模型及动力学方法。利用这些模型和方法,基于单补丁胶体粒子体系自组装,我们提出了手性纳米螺旋阵列的自限制自组装策略。通过调节单补丁胶体粒子的补丁尺寸及补丁相互作用强度,成功实现了由螺旋柱状结构规则排列构成的手性胶体晶体,阐明了手性胶体晶体的形成机理及调控规律。此外,针对手性和聚集作用如何共同调控手性棒状胶体粒子自组装形成扭曲液晶组装体,开展了系统的理论模拟研究,明晰了手性棒状胶体的手性和聚集作用间的协同作用规律,揭示了手性液晶组装体形成中的两步手性传递机制,为多层次手性光学材料的设计与构筑提供了理论依据。

Z-243

嵌段共聚物自组装有序相结构预测的自动化技术

刘一新*

复旦大学

嵌段共聚物高分子材料因其能在纳米尺度形成丰富且可控的有序相结构,一直是理论和实验研究的热点领域。近年来,自洽场理论方法(SCFT)已发展成为计算和预测嵌段共聚物有序相结构的 SOTA (State-Of-The-Art) 方法。然而,当前的 SCFT 计算严重依赖人工干预,使得整个计算流程繁琐、冗长并且低效。为了解决这一困扰,我们发展了一系列辅助技术,实现了 SCFT 预测嵌段共聚物有序相结构的全流程自动化。首先,我们发展了一种基于散射理论的自动识别有序相结构的方法(SAIS),从而免除人工检查 SCFT 的计算结果是否为目标有序相结构的步骤,为相图计算的自动化奠定了基础[1]。其次,嵌段共聚物的相结构计算通常需要在特定元胞形状和尺寸下求解 SCFT 方程。为了获得能量最低的相结构,必须同时优化元胞的形状和尺寸,这是一个涉及多参数优化的问题。我们将固定元胞形状和尺寸条件下的 SCFT 求解视为一个“黑盒”函数,并引入多种优化算法,旨在尽可能减少调用 SCFT 求解的次数。通过这种优化方法,并结合先前发展的 SAIS 工具,可快速无误地找到能量最低的相结构。最后,为了实现在计算过程中在线更换所计算的嵌段共聚物链结构,我们提出了高分子链拓扑结构的图论表示,并基于此开发了图论增强的 SCFT 计算方法[2]。将以上三种技术相结合,我们实现了随机链结构—平衡有序相结构的能量—稳定相预测的全流程自动化。该研究发展的自动化技术不仅能够提升现有计算流程的效率,还为探索与设计更复杂的嵌段共聚物体系的相行为提供了新思路和新方法。

参考文献:

[1] Zhang, Y.; Huang, W.; Liu, Y. X. Chinese. J. Polym. Sci. 2024, 42, 683.

[2] Zhang, Y.; Huang, W.; Liu, Y. X. Communication Materials 2024, 5, 266.

Z-244

嵌段共聚物受限自组装的模拟研究

于彬

天津师范大学

科学界将液晶、聚合物、胶体、膜、泡沫、颗粒物质、生命物质等由大分子或基团组成的一类物质称作软物质或复杂流体。软物质兼有液体式的强热涨落行为和固体的相对强约束特征,其在自然界、生命体、日常生活和生产中广泛存在。嵌段共聚物属于典型的软物质。由于其丰富的自组装行为以及在技术应用上的重要性,嵌段共聚物体系作为凝聚态物理和化学学科的交叉研究领域已经成为备受关注的重要领域之一。在对嵌段共聚物的研究中,人们发现可以通过控制共聚物体系外部环境来得到长程有序和新颖的结构。所以,通过这种方法人们可以制备各种工业模板、功能型高分子纳米材料甚至仿生纳米材料。我们采用模拟退火方法系统地研究了线型双嵌段共聚物体相和受限在平行板间(1D),柱状纳米孔(2D)和球形纳米孔(3D)的自组装行为。研究表明在受限条件下,结构受挫、受限效应导致的熵减少以及受限表面的作用强

烈地影响嵌段共聚物的自组装行为。受限效应和表面曲率的共同作用可使体系形成体相中不存在的新颖结构。在预测了许多新颖结构形态的同时，也阐明了其形态和链构象随共聚物组分及链结构、表面作用、受限效应、受限空间的几何形状等因素的演化规律。

Z-245

针状焦中间相结构及生焦抑制剂对聚合的影响

任强

中石化石油化工科学研究院有限公司

以萘的低聚物为模型化合物，采用分子动力学方法考察了不同聚合度对针状焦中间相的影响规律，同时用量子化学方法研究了不同的生焦抑制剂对聚合反应的影响。研究发现，针状焦中间相分子的聚合度大小应适中，三聚物和四聚物是针状焦中间相理想的分子结构；同时，为了得到理想的中间相，可通过添加生焦抑制剂的方法来湮灭大分子自由基，避免过度聚合生成更大的分子，从而控制生成中间相分子的大小。同时，在炼油过程的其它工艺过程中，也可采用通过加入生焦抑制剂方法来减少焦炭的生成。

Z-246

极端条件下超临界含碳流体中有机物的合成与机理分析：对深地生命起源的启示

李涛、潘鼎*

香港科技大学

生命起源问题向来是化学和生命科学中的皇冠，一直以来吸引着人们的关注。从外太空到地球浅层环境，科学家提出过许多理论和假设，但没有一种得到广泛认可。本研究探讨了地球上地幔极端压力（10-13 GPa）和温度（1000-1400 K）条件下生命起源的可能性。采用从头算分子动力学（AIMD）模拟，我们研究了高压高温环境下无机小分子间的化学反应。研究发现，在无机 C-H-O-N 流体体系中（初始成分为 CO、H₂O、H₂、NH₃），大量有机化合物能够自发形成并稳定存在。这些化合物可以进一步转化为甲酰胺、甘氨酸、核糖和核碱基等生物分子或其前驱体。与之前认为大型有机分子可能在极端条件下的水溶液中迅速降解的观点相反，我们的研究表明这些合成的生物分子在 C-H-O-N 流体中可以稳定存在，这有可能为生命起源的早期阶段提供了必要的初始组分。自由能计算证实，10 GPa 和 1400 K 的条件有利于这些生命相关的有机分子的生成和稳定存在。该研究揭示了极端深地条件下生物分子合成的潜在路径和相关反应机理，为地球深部生命起源假说提供了重要的理论支撑。

相关文章：Li, Tao; Stolte, Nore; Tao, Renbiao; Sverjensky, Dimitri A.; Daniel, Isabelle; Pan, Ding*. Synthesis and Stability of Biomolecules in C-H-O-N Fluids under Earth's Upper Mantle Conditions. Journal of the American Chemical Society, 146 (45), 31240–31250 (2024).

Z-247

有限温度下中性水分子团簇中的核量子效应：从二维到三维结构的演变

李梦旭^{*1}、孔佳乐¹、王鹏举³、兰晶岗²、苏艳¹、赵纪军⁴

1. 大连理工大学

2. 深圳理工大学

3. 之江实验室

4. 华南师范大学

液态水的结构由于复杂的氢键网络，准确描述其结构一直是一项极具挑战性的任务。中性水分子团簇作为基本构建单元，为研究氢键构型和分子间相互作用提供了重要的视角，从而为阐明液态水的行为奠定了关键的基础。在本研究中，采用基于水多体势的量子模拟方法研究核量子效应（NQEs）对中性水分子团簇（H₂O）_n（n = 2 - 10）结构演变的影响。对于有限温度下的五聚体，量子模拟表明 NQEs 大大促进了从二维（2D）到三维（3D）结构的转变，三维异构体的分布由热涨落和 NQEs 的协同作用共同决定。而对于具有完全三维结构的水六聚体，量子模拟揭示了一条从棱柱结构到书型结构的更低能量的结构演变路径，这是在经典模拟中从未被观察到的。这些发现凸显了 NQEs 在水分子团簇结构演变过程中的关键作用，并为研究凝聚态水的结构和动态特性提供了理论框架。

Z-248**基于显式及隐式水分子-离子模型的饱和 NaCl 水溶液短程序结构的研究**

刘荣、林晓航*

山东大学

通过 DFT 模拟和液态 XRD 实验相结合的方法确定了饱和氯化钠溶液的短程有序 (SRO) 结构。通过结合显式溶剂模型和隐式溶剂模型的模拟方法,从能量与成键状态确定了饱和氯化钠溶液中钠离子 - 水分子络合簇 $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ 和氯离子 - 水分子络合簇 $\text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_n$ 的特征结构,并得到其模拟 XRD 曲线。另一方面,通过液态 X 射线衍射 (XRD) 获得了饱和氯化钠溶液的 XRD 实验数据。模拟 XRD 结果与实验结果进具有较好的一致性,包含第一峰、第二峰的位置/范围还是其相对高度。最终确定了饱和氯化钠溶液中离子-水络合物的热力学统计特征结构,并提出了确定溶液短程序结构的新范式。

墙报**Z-P01****基于细观力学的短切纤维增强气凝胶复合材料变形行为建模方法**

吕双祺*、郭川、王伟、周俊、李超东

中国民用航空飞行学院

作为一种高效承载隔热材料,短切纤维增强气凝胶复合材料在空天热防护领域有着广泛的应用。本文基于细观力学思想与代表性体积单元方法,建立了描述气凝胶复合材料变形行为的建模与仿真方法。基于 Weibull 分布函数实现了曲率、长度、俯仰角、体积分数可调的短切纤维网络几何模型,可以表现细观尺度上纤维几何尺寸特征与空间分布特征的随机性。基于微结构损伤演化机制,发展了纤维/基体/界面多组分耦合损伤的本构关系模型,结合用户材料自定义子程序 Umat 与有限元方法,实现了气凝胶复合材料变形行为的数值模拟。本文建立的力学模型与仿真方法可以较好地描述气凝胶复合材料的变形行为与非线性特征,与试验结果对比具有良好的一致性。

Z-P02**Unravelling phase transformation with phononic hyperbolicity using off-resonant terahertz light**

Hanli Cui*, Jian zhou

Xi'an Jiaotong University

Noncontacting and nondestructive control of geometric phase in conventional semiconductors plays a pivotal role in various applications. In the current work, we present a theoretical and computational investigation on terahertz (THz) light-induced phase transformation of conventional binary semiconducting compounds among different structures including rocksalt, zinc-blende, wurtzite, and hexagonal phases. Using MgS and MgSe as prototypical examples, we perform anharmonic phonon mediated calculations and reveal large contrasting lattice contributed dielectric susceptibility in the THz regime. We then construct a THz-induced phase diagram under intermediate temperature and reveal a rocksalt to hexagonal and then wurtzite structures under increased light intensity. This does not require a high temperature environment as observed in experiments. The low energy barrier suggests that the phase transition kinetics can be fast, and the stable room temperature phonon dispersions guarantee their non-volatile nature. Furthermore, we disclose the phononic hyperbolicity with strong anisotropic THz susceptibility components, which serves as a natural hyperbolic material with negative refractive index. Our work suggests the potential to realize metastable hidden phases using noninvasive THz irradiation, which expands the conventional pressure-temperature phase diagram by adding light as an additional control factor.

Z-P03**Period-Length and Atomic Substitution Modulation for Enhanced Thermoelectric Performance in WS_2/WSe_2 Superlattices**

Junjie Gao*

Harbin Institute of Technology, Shenzhen

We propose an innovative strategy to enhance the thermoelectric performance of WS_2/WSe_2 lateral superlattices through period length optimization and atomic substitution. Using first-principles calculations

combined with the number band method and Landauer theory, we demonstrate that optimizing the superlattice period can yield a $(\text{WS}_2)_4/(\text{WSe}_2)_4$ configuration with a remarkable ZT value of 1.31 (cross-plane, y-direction) and 1.202 (in-plane, x-direction) at room temperature (300 K), achieving over 200% enhancement compared to monolayer materials. Mechanistic analysis reveals that in the x-direction, the improvement stems from step-like transmission coefficients induced by band convergence, resulting in an eightfold increase in the power factor (PF), surpassing the rate of increase in phonon thermal conductivity with period length. In the y-direction, interface engineering optimizes performance by reducing thermal conductivity by 53% while maintaining PF stability. Further adjusting the asymmetric S/Se ratio can boost the power factor by 50% with negligible change in thermal conductivity, achieving a ZT of 1.1. This study highlights the critical role of period length in anisotropic ballistic transport and establishes period modulation as a transformative approach for designing 2D thermoelectric materials, emphasizing the importance of structural and compositional complexity in maximizing thermoelectric efficiency.

Z-P04

Valley-dependent giant orbital moments and transportation in rhombohedral graphene multilayers

Xingchi Mu, Jian Zhou*

Xi'an Jiaotong University School of Materials Science and Engineering

Recent years have witnessed a great interest in orbital related electronics (also termed as orbitronics). In the current work, we present a first-principles calculation on the orbital magnetic moments, intrinsic orbital Hall effect, and ordinary magnetoresistance effects in rhombohedral graphene multilayers. Our calculations suggest a giant orbital moment that arises from inter-atomic cycloid motion, reaching over $30 \mu_B$ under an intermediate gate voltage. This leads to a valley polarization under an external magnetic field, as observed in recent experiments. In addition, the orbital-related transportation feature exhibit significant responses that are potentially observed in experiments. We also suggest that under a periodic field driven (such as high frequency light field), the ungated graphene multilayers could host strong quantum anomalous and orbital Hall effects, engineered by the layer number. As the graphene multilayers are intrinsically nonmagnetic with negligible spin-orbit coupling, the orbital moments would not be entangled by spin-related signals. Thus, they serve as an ideal platform to conduct orbitronic measurement and utilization for next generation information read/write nanodevices.

Z-P05

Key interface factors in total ionizing dose effect of 4H-SiC MOS devices

Chenfeng Ji^{1,2}, Jun Liu¹, Yonggang Li^{*1,2}

1. Key Laboratory of Materials Physics, Institute of Solid State Physics, HFIPS, Chinese Academy of Sciences
2. University of Science and Technology of China

Interface dynamics play a crucial role in the total ionizing dose effect of 4H-SiC MOS devices. In this work, a dynamic model is developed to simulate the microscopic evolution of defects and carriers in both the oxide and channel regions of 4H-SiC MOS devices, by incorporating interface effects arising from the trapping of channel carriers at the SiC/SiO₂ interface after tunneling through the interface energy barrier. The influence of three key interface factors on this interface effect is examined, including the characteristics of interface traps, the tunneling probability and the interface electric field. The results show that the characteristics of interface traps and the tunneling probability are influenced by fabricating processes, including nitrogen annealing and substrate doping. Thus, balance between carrier mobility and radiation resistance performance should be considered. The interface electric field can be modulated by gate bias during irradiation. Although conventional negative gate bias annealing is effective in migrating threshold voltage drift, it should aim to minimize the interface electric field for high frequency devices.

Z-P06

TA15 合金熔体原子扩散行为和黏度的第一原理分子动力学研究

黄伟铎^{1,2}、李文渊¹、刘时兵³、周刚^{*1}

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国科学技术大学

3. 中国机械总院集团沈阳铸造研究所有限公司, 高端装备铸造技术全国重点实验室

TA15 合金是一种广泛用于航空航天领域的近 α 型钛合金, 常被用于制造复杂薄壁结构铸件, 而合金熔体的原子扩散行为和黏度对铸件的性能具有重要影响。为分析该合金熔体的原子扩散行为并获得黏度, 本研究建立了 TA15 合金熔体模型, 开展了多个温度下的第一原理分子动力学模拟。选取 2000 K 合金熔体的 90 ps 模拟轨迹进行详细分析, 采用偏双体分布函数、偏配位数、偏键角分布函数和 Voronoi 剖分等方法表征不同合金元素的结构特征, 并采用速度自相关函数和各元素的扩散系数等参数表征不同元素在该熔体中的运动方式。随后, 通过均方位移计算了该合金在 2000 K、1900 K 和 1800 K 三个温度下的总扩散系数, 并采用 Green-Kubo 方法计算了该合金在不同温度下的黏度值。结果表明, 不同元素的原子运动速率存在差异, 并且熔体的局域结构影响了原子的“回流”行为, 二者共同作用下, 各元素展现出不同的扩散系数, 其中 V 的扩散系数较大, Zr 和 Mo 的扩散系数较小。此外, 获得了该合金在三个温度下的黏度值, 并进一步验证了黏度与扩散系数间 Stokes-Einstein 关系的适用性。本研究有助于深入理解 TA15 合金熔体中不同元素的作用方式, 可为铸造钛合金的成分优化提供理论基础。

Z-P07

通过非互易光散射实现 PT 反铁磁体中尼尔矢量的反转

薛倩倩、周健*

西安交通大学

反铁磁自旋电子学因其超快动力学特性、零杂散场、抗外场干扰能力以及在微型化磁存储器件中的应用潜力而受到广泛关注。其中, 光学调控反铁磁尼尔矢量已成为前沿研究热点。本研究提出一种基于能量变化的非互易光散射机制, 通过计算双稳态尼尔极化构型的能量差, 实现 PT 反铁磁多层膜中尼尔矢量的翻转。我们采用低能 $k \cdot p$ 模型进行理论阐释, 并对两种典型 A 型反铁磁材料 (MnBi_2Te_4 和 CrI_3 薄膜) 进行第一性原理计算。研究表明: 光的手性与入射光子频率均可调控双稳态尼尔矢量态的相对稳定性。基于该理论参数无关性相图计算与近期实验结果高度吻合。该机制为通过超快光磁相互作用调控反铁磁序提供了有效途径。

Z-P08

机器学习分子动力学研究 TiO_2 高压相变

姜振益*

西北大学

Abstract: The phase transition (PT) behaviors of the baddeleyite phase at high pressure and temperature have been studied with deep-learning potential molecular dynamics (DPMD) simulations for bulk TiO_2 . Our theoretical results indicate the baddeleyite $\rightarrow$ OI phase is a first-order martensitic-like collective PT under hydrostatic pressure of around 80 GPa at room temperature. A new 8-coordinated orthorhombic phase (O-IV phase, space group Pbcm, No. 57) will emerge under hydrostatic pressure of around 87 GPa at room temperature which has been expected since 2001. The so-called modified fluorite phase (orthorhombic O-III phase, Pca21) is most likely to emerge during domain switching in baddeleyite phase driven by hydrostatic (~ 40 GPa) and shear pressure (~ 5 GPa) coupling. There are a large number of chiral vortex and Bain distortion occur at the boundary of four adjacent vortex in the O-III $\rightarrow$ orthorhombic columbite martensitic-like PT of large bulk TiO_2 . Driven by high temperature, the baddeleyite phase and the orthorhombic O-III phase nucleate and grow up in the two dimensional (2D) plane with martensitic-like PT and reconstructive PT, respectively, and then expand into the orthorhombic OI phase layer by layer. Our DPMD simulations can provide new insights into the existence of the cubic phase (O-III phase), which has been debated experimentally for 20 years.

Z-P09

Molecular Dynamics Study on the Tensile-Compressive Asymmetry and Microscopic Deformation Mechanisms of Polycrystalline Cu/ Al_2Cu /Al Interfaces

Hui Zhang, Aiqin Wang*

Henan University of Science and Technology

Abstract: This study investigates the tensile-compressive asymmetry and underlying deformation mechanisms of polycrystalline Cu/Al₂Cu/Al interfaces using molecular dynamics simulations. The results reveal three key findings: 1, Elastic Modulus Asymmetry: The material exhibits a significantly higher elastic modulus under compression than under tension, indicating greater stiffness in the compressed state; 2, Brittleness and Ductility Asymmetry: The material tends to undergo brittle fracture under tension, while it displays higher ductility under compression. This difference is attributed to the closure of microcracks during compression, which resists further deformation, whereas microcracks readily propagate under tension, leading to material fracture; 3, Tensile and Compressive Strength Asymmetry: The compressive strength of the material is significantly higher than its tensile strength. This phenomenon stems from the distinct critical stresses required to activate slip systems under tensile and compressive loads. Mechanistic analysis indicates that during tension, plastic deformation primarily occurs through grain boundary migration (GBM), characterized by the transformation of FCC structures into grain boundaries, resulting in increased grain boundary width. Meanwhile, HCP structures exhibit minimal atomic changes, restricting dislocation slip. Microcracks preferentially nucleate near the Al₂Cu/Al interface, exhibiting typical brittle fracture characteristics. In contrast, during compression, the plastic deformation mechanism is more complex, involving the synergistic action of dislocation slip, FCC-to-BCC structural transformation, twinning, and grain rotation. Compressive stress activates more slip systems, leading to a significant increase in hcp atom numbers and dislocation density with increasing strain, thereby significantly enhancing the material's load-bearing capacity under compression. In summary, the tensile-compressive asymmetry of the polycrystalline Cu/Al₂Cu/Al interface originates from the distinct microstructural and deformation mechanisms under different loading conditions. These findings provide important theoretical insights into the mechanical behavior of polycrystalline material interfaces and offer guidance for the design and application of related materials.

Z-P10**基于损伤力学的修正蠕变本构模型**

陈恒

滨州魏桥国科高等技术研究院

蠕变作为材料的固有属性，是表征材料长期力学行为的重要因素。蠕变模型起到连接实验和数值模拟的关键作用。为了弥补经典模型难以准确描述蠕变响应的不足，基于经典的伯格斯蠕变模型，引入连续介质损伤力学理论，建立了修正的蠕变本构模型。该模型考虑了蠕变全过程的损伤效应，能够描述包括加速蠕变阶段在内的三个蠕变阶段的力学响应。

Z-P11**转角 CrI3 的磁性和铁电性相图**

叶浩燊

东南大学

转角二维层状材料为低维奇异物理现象提供了丰富的研究平台。尽管从电子结构角度发展的"转角电子学"已取得诸多突破性发现，但莫尔铁性序因其相对简单的构型特征尚未获得足够重视。传统刚性晶格模型在多数情况下虽能给出近似描述，但在本研究中，我们发现层间堆叠势会自发诱导局部晶格弛豫，这对理解转角 CrI₃ 中的铁性序至关重要。结果显示，磁基态对堆叠构型和转角具有高度依赖性，而晶格弛豫会对此产生显著影响。特别是在双层体系中，刚性晶格模型所预测的磁泡自旋结构却会因弛豫效应而消失。相比之下，受拓扑保护的铁电涡旋则表现出更强的鲁棒性，其结构对弛豫效应、转角大小和厚度均保持稳定特性。

Z-P12**缺陷诱导双层石墨烯铜原子杂化体及其对石墨烯增强铜基复合材料力学性能的影响**逢金硕¹、师荣荣¹、谢昊男¹、陈宏鹏¹、张翔¹、赵冬冬¹、师春生¹、何春年¹、赵乃勤^{1,2}、刘恩佐*¹

1. 天津大学材料学院

2. 天津化学科学与工程协同创新中心

铜及其合金具有良好的导电、导热性能,以及良好的化学稳定性,但其力学性能相对较差限制了其应用。石墨烯因其优异的力学性能和功能特性被认为是铜基复合材料的理想增强相,石墨烯增强铜基复合材料在机械工程、电子器件等领域都显示出了巨大的潜力。但在实际制备材料的过程中,石墨烯层数与质量难以控制,这为复合材料制备带来了巨大的挑战。空位缺陷影响石墨烯层间相互作用的机制,以及石墨烯层间键合影响石墨烯增强铜基复合材料力学性能的相关机制均不够清晰。基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,可以从原子尺度为材料设计实验提供更可靠的理论支撑。

本文利用第一性原理计算系统地研究了空位缺陷对双层石墨烯层间相互作用的影响,以及石墨烯层间结合对石墨烯增强铜基复合材料界面结合、界面拉伸力学性能和滑移机理的影响。研究表明,跨层聚集的空位缺陷可以诱导形成不同杂化类型(sp^2 杂化键、 sp^3 杂化键)的石墨烯层间共价键,这可以显著增强石墨烯层间的电荷转移,进而提升双层石墨烯的层间结合强度。此外,相比 sp^3 杂化键, sp^2 杂化键对石墨烯面内电子结构的影响更低。模拟拉伸实验表明,缺陷石墨烯的力学性能仍然高于纯铜基体,而带有层间 sp^2 杂化键的石墨烯面内力学性能损害更低,可以优先被选择作为增强相来提高铜基复合材料的性能。

对于石墨烯增强铜基复合材料来讲,石墨烯缺陷的存在会使得复合材料界面处产生明显的电荷转移,进一步分析电子结构发现邻近空位缺陷的不饱和 C 原子其 $2p$ 轨道与铜表面原子的 $4s$ 、 $3d$ 轨道之间存在明显的轨道杂化峰。并且,层间键的存在使得石墨烯面外 π 键被破坏的程度更低,这提高了复合材料的界面结合强度。拉伸和滑移模拟实验表明,在形变过程中,石墨烯缺陷和铜基体之间的强相互作用会导致铜表面原子嵌入带有层间键的双层石墨烯之中,形成石墨烯-铜原子杂化体,杂化体的存在可以显著提高复合材料的界面结合和力学性能。本研究为石墨烯增强铜基复合材料的界面工程研究和创新发展提供了新的见解。

Z-P13

含硫氰酸根 (SCN-) 的二维无机钙钛矿光电探测器材料的载流子动力学研究

任斐斐、韩丹*

吉林大学

近年来,二维卤化钙钛矿因其优异的光电性能与环境稳定性,被广泛应用于柔性、低功耗光电探测器¹。其中,全无机二维钙钛矿 $Cs_2PbI_2Cl_2$ 具备良好的紫外响应和稳定性,在自供能器件中展现出一定潜力,但其宽带隙、低迁移率与高激子结合能限制了器件性能^{2,3}。为突破性能瓶颈,SCN-作为新型调控离子被引入二维钙钛矿中。SCN-离子具备多齿配位能力与 π 共轭特性,可用于调控晶体结构与电子态分布,优化能带结构、增强层间耦合,同时有望降低激子结合能并拓展光吸收范围^{4,5}。

我们的第一性原理计算表明,含 SCN-的 $Cs_2Pb(SCN)_2Br_2$ 与 $Cs_2Pb(SCN)_2I_2$ 相较于 $Cs_2PbI_2Cl_2$ 带隙减小、吸收强度与介电响应增强,表现出更强的光电探测潜力;而 $Cs_2Pb(SCN)_2Cl_2$ 光电子性能改善有限。通过 Hefei-NAMD 模拟,我们发现尽管 $Cs_2Pb(SCN)_2Br_2$ 与 $Cs_2Pb(SCN)_2I_2$ 体系的激子结合能更低,但载流子寿命反而较短,揭示传统静态模型的局限。通过引入退相干时间分析,我们进一步明确了寿命趋势由非绝热耦合与退相干行为共同决定,后者主导了激发态耗散过程。

本理论模拟研究从静态与动态视角揭示了 SCN- 在二维无机钙钛矿中的调控机制,并强调非绝热耦合与退相干行为协同作用对载流子寿命的关键影响,为高性能二维钙钛矿材料的设计提供了新思路。

参考文献:

- (1) Li, Z.; Hong, E.; Zhang, X.; Deng, M.; Fang, X. Perovskite-Type 2D Materials for High-Performance Photodetectors. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2022**, 13 (5), 1215-1225.
- (2) Guo, S.; Bu, K.; Li, J.; Hu, Q.; Luo, H.; He, Y.; Wu, Y.; Zhang, D.; Zhao, Y.; Yang, W.; et al. Enhanced Photocurrent of All-Inorganic Two-Dimensional Perovskite $Cs_2PbI_2Cl_2$ via Pressure-Regulated Excitonic Features. *Journal of the American Chemical Society* **2021**, 143 (6), 2545-2551.
- (3) Maria, I.; Acharyya, P.; Voneshen, D.; Dutta, M.; Ahad, A.; Etter, M.; Ghosh, T.; Pal, K.; Biswas, K. Evidence of Lone Pair Crafted Emphasis in the Ruddlesden-Popper Halide Perovskite $Cs_2PbI_2Cl_2$. *Advanced Materials* **2024**, 36 (41), 2408008.
- (4) Liao, C.-H.; Chen, C.-H.; Bing, J.; Bailey, C.; Lin, Y.-T.; Pandit, T. M.; Granados, L.; Zheng, J.; Tang, S.; Lin, B.-H.; et al. Inorganic-Cation Pseudohalide 2D $Cs_2Pb(SCN)_2Br_2$ Perovskite Single Crystal. *Advanced*

Materials **2022**, 34 (7), 2104782.

(5) Wu, W.; Liu, Y.; Xu, J.; Yao, J.; Shi, C.; Wang, X. Enhanced exciton–phonon coupling in pseudohalide 2D perovskite for X-ray to visible light detection. Chemical Communications **2024**, 60 (78), 10902-10905.

Z-P14

Theoretical study of mechanical, electronic, optical and thermodynamic properties of fcc-Ru interconnect materials in integrated circuits

Liqiong Wang¹, Xiuhua Chen^{*1,3}, Wenhui Ma^{2,3}, Chen Li², Zhaorui Sun¹, Tengyu Wang¹, Zifan Xu⁴

1. School of Materials and Energy, Yunnan University

2. School of Engineering, Yunnan University, Kunming 650504, China.

3. National Joint International Research Center for Optoelectronic Energy Materials, Yunnan University, Kunming 650504, China.

4. Institute of International Rivers and Eco-Security, Yunnan University, Kunming 650500, China.

In order to explore the basic physical properties of fcc-Ru interconnect materials in integrated circuits, the first-principles calculation method based on density functional theory (DFT) was used to study systematically the mechanical, electronic, optical and thermodynamic properties of fcc-Ru. The calculation results of elastic constant and density of states curves showed that the fcc-Ru had mechanical stability and thermodynamic stability. The calculation results of BH/GH and Poisson's ν indicated that fcc-Ru was a brittle material. The research results of mechanical properties indicated that the bulk modulus B was isotropic, while the shear modulus G and Young's modulus E exhibited anisotropy. The research results of band structure, the density of state and optical properties have further confirmed the metallic properties of fcc-Ru, and there is an intensified hybridization between the Ru-p and Ru-d states, thus forming strong Ru-Ru chemical bond in fcc-Ru. Finally, the quasi-harmonic Debye model was used to study the thermodynamic properties of fcc-Ru in the pressure range of 0-40 GPa and the temperature range of 0-1000K, including heat capacity (CV, CP), thermal expansion coefficient (α), Debye temperature (θ_D) and Grüneisen parameter (γ).

Z-P15

一类单超原子催化剂的理性设计及其催化 Suzuki 反应的理论研究

张智超、王炜煌、杜敏宁、施馨羽、陈瑶、孙伟明*

福建省药物靶点发现与结构与功能研究重点实验室, 福建省纳米生物医学技术高等学校重点实验室, 福建医科大学药学院基础化学系, 福州, 350108

2011 年, 多个课题组合作首次提出单原子催化剂 (Single atom catalysts, SACs) 的概念。SACs 是指通过将单个金属原子锚定到合适的载体上, 最大限度地利用金属原子的催化剂。通常, 这种催化剂具有高效、低毒、稳定性高、可控性强、精准催化等优点。本研究通过将 Pd 原子具有相同电子结构的 NbN 超原子分别取代 B12N12、Al12N12、Ga12N12 中的一个 MN (M = B, Al, Ga) 单元, 设计了一类新型“单超原子催化剂 (Single superatom catalysts, SSCs)”, 即 NbN@B11N11、NbN@Al11N11、NbN@Ga11N11。研究表明: 其中的 NbN@B11N11 在催化 Suzuki 反应时具有最佳的活性, 三种催化剂的活性按 NbN@B11N11 > NbN@Al11N11 > NbN@Ga11N11 的顺序递减。此外, 我们还进一步考察了不同尺寸的 (BN)_n (n = 16, 24) 载体对催化性能的影响, 研究发现: NbN@(BN)_n 的催化性能表现出显著的尺寸依赖性, 并且随着载体尺寸的增大, 性能逐渐减小。因此, 本研究为单超原子催化剂的设计提供了一种新策略, 为设计用于 C–C 或 C–N 偶联反应的催化剂开发开辟了新途径。

Z-P16

Hydration Dynamics and Selective Transport of Li⁺/Mg²⁺ separation in Hydrophobic Nanochannels

Meili Yuan, Yuanyuan Qu*

Shangdong University

The rising demand for lithium-ion batteries drives innovation in brine extraction technologies. Despite salt lake brines comprising a major fraction of global lithium reserves, the critical challenge lies in achieving efficient Li⁺/Mg²⁺ separation due to their similar hydration radii. Through all-atom molecular dynamics simulations, we

reveal fundamental difference in hydration dynamics under hydrophobic confinement. Li^+ exhibits dynamic hydration shell adaptability, enabling rapid structural reconfiguration and efficient permeation, whereas Mg^{2+} retains a rigid hydration structure that disrupts interfacial water networks, leading to elevated local water density and significantly hindered mobility. Free energy analysis further demonstrates that Mg^{2+} faces an energy barrier of up to 23.4 kJ/mol at channel constrictions, with confinement effects especially pronounced in the interlayer regions. These findings provide microscopic insight into ion-specific hydration and mobility under hydrophobic confinement, underpinning the design of highly selective nanochannels for lithium extraction. Altogether, this work establishes a hydration dynamics-guided framework for next-generation separation membranes, offering a promising solution to the impending lithium supply challenge.

Z-P17

Screening proper metal-doped borospherene B40M for delivering 5-fluorouracil: A theoretical study

Bin Liu, Yan Chen, Jia-Ling He, Juan Wu, Jing-Hua Chen, Wei-Ming Sun*

Fujian Medical University

Abstract

The direct interaction between drug molecules and nanomaterials at the molecular level has been systematically studied with the help of quantum chemical computations.[1-5] Boron nanomaterials, as emerging nanomaterials with many excellent physicochemical, mechanical, and biological properties, have shown great promise in the field of drug delivery.[6-8] In this study, the interaction between B40M ($M = \text{K} \sim \text{Zn}$) nanocages and 5-fluorouracil (5-Fu) anticancer drug has been systematically investigated using density functional theory (DFT). Among these considered boron-based nanocages, B40M ($M = \text{K}, \text{Ti}, \text{V}, \text{and Fe}$) exhibit remarkable adsorption capacity for 5-Fu. It is found that the linkage K-O2 bond between B40K and 5-Fu shows typical ionic characteristics, while the M-O bonds between B40M ($M = \text{Ti}, \text{V}, \text{and Fe}$) and 5-Fu exhibit both of ionic and covalent bonding characteristics. It is interesting to find that the E_{ad} value of 5-Fu@B40V is reduced from -20.34 to -9.61 kcal/mol under weakly acidic conditions. Based on these findings, the B40M ($M = \text{K}, \text{Ti}, \text{V}, \text{and Fe}$) nanocages are identified as promising drug carriers for 5-Fu and even other drugs. This study provides a new strategy to improve the delivery efficiency and antitumor performance of drugs from the theoretical perspective.

References

- [1] Zhang, L.; Cheng, X.; Li, X. H.; Chen, J. H.; Sun, W. M. *J. Mol. Liq.* 2022, 360: 119388.
- [2] Cui, Y. F.; Zhang, L.; Wang, W. L.; Yang, J. F.; Chen, J. H.; Sun, W. M. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2023, 56(44): 445401
- [3] Zhang, L.; Zhang, J. C.; Shi, L. F.; Cheng, X.; Chen, J. H.; Sun, W. M. *J. Mol. Liq.* 2023, 118: 108378.
- [4] Guo, Y. X.; Liu, B.; Wang, W. L.; Kang, J.; Chen, J. H.; Sun, W. M. *J. Mol. Graph. Model.* 2023, 125: 108617.
- [5] Liu, B.; Zhang, J. C.; Ye, Y. L.; Chen, J. H.; Sun, W. M. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2025, 27: 5710.
- [6] Zhang, L.; Ye, Y. L.; Li, X. H.; Chen, J. H.; Sun, W. M. *J. Mol. Liq.* 2021, 342: 117533.
- [7] Zhang, L.; Qi, Z. D.; Ye, Y. L.; Li, X. H.; Chen, J. H.; Sun, W. M. *RSC Adv.* 2021, 11(62): 39508.
- [8] Liu, B.; Wang, W. L.; Su, Y. N.; Ye, Y. L.; Sun, W. M. *Comput. Theor. Chem.* 2025, 1244: 115022.

Z-P18

Exotic Quantum Properties of One-Dimensional Atomic Wires

Chufeng Huang^{1,2}, Chanjuan Shang³, Yanyan Zhao⁴, Jijun Zhao^{1,2}, Si Zhou^{*1,2}

1. South China Normal University

2. Guangdong-Hong Kong Joint Laboratory of Quantum Matter, Frontier Research Institute for Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China

3. School Key Laboratory of Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams (Dalian University of Technology), Ministry of Education, Dalian 116024, China

4. Advanced Materials Division, Suzhou Institute of Nano-Tech and Nano-Bionics, Chinese Academy of Sciences,

Suzhou 215123, China

With the progress of synthetic techniques, one-dimensional atomic wires have attracted significant attention. Their non-periodicity in two directions leads to weak dielectric screening, while the nature of electron interactions remains unclear. Using first-principles methods, we studied NbI₃, WTe₃, and M₆Te₆ (M = Mo, W). (1) Density functional theory (DFT) calculations show that NbI₃ exhibits strong electron-phonon interactions, causing a Peierls transition in its D2h phase and a transition from metal to semiconductor. (2) When atomic wires are encapsulated in carbon nanotubes, they twist. We found that twisting WTe₃ can induce a transition from metallic to semiconducting behavior. We also propose a mechanism for light-induced pure spin current generation without net electric charge current, leading to magnetic moment accumulation at the ends of twisted wires and a significant spin voltage along the axial direction. (3) The strong confinement and weak screening effects enhance electron-hole interactions. Our GW+BSE calculations on M₆Te₆ (M = Mo, W) reveal large exciton binding energies exceeding single-particle band gaps, suggesting potential exciton Bose-Einstein condensation. Overall, one-dimensional atomic wires exhibit exotic quantum phenomena, holding high research value in twistrionics, chiral spintronics, and excitonic effects.

Z-P19**水在 Ru(0001)表面机器学习分子动力学研究**曹宇¹、王建韬¹、刘鸣凤¹、刘焱¹、马会¹、Cesare Franchini²、孙岩¹、Georg Kresse²、陈星秋¹、刘培涛^{*1}

1. 中国科学院金属研究所

2. University of Vienna

水在固体表面的吸附与解离行为直接影响着材料表面的稳定性、腐蚀防护、光催化水分解和电化学制氢等诸多关键过程。然而，由于固-水界面相互作用以及水中氢键网络的相互竞争，导致金属表面的水分子构型十分复杂。比如金属钌表面的水是以分子态吸附还是解离态存在，学术界长期存在争议。实验手段因受限于时空分辨率，难以捕捉水的动态构型，导致了部分结果支持金属钌表面水以分子态吸附，而另一些实验则支持水以解离态吸附。针对这一科学难题，我们发展了升级版矩张量机器学习势模型，通过模拟退火并结合遗传算法优化矩张量缩并路径，使得非等价中间张量数量及缩并次数最低，实现了精度与效率兼顾，不但在计算精度方面接近密度泛函理论精度，能准确捕捉界面水复杂的结构和氢键的微妙变化，而且计算效率也大幅度提升，为复杂体系的跨尺度原子模拟提供了新手段。通过路径积分分子动力学模拟，首次在亚微秒（几百纳秒）时间尺度上模拟揭示了氢质子量子隧穿的动态过程，不仅捕捉到氢原子的量子离域特性，还揭示了金属钌(0001)表面水分子通过量子协同机制分解为氢离子 H⁺和氢氧根离子 OH⁻的完整路径，在原子尺度模拟实现了水分子在核量子效应驱动下的解离现象，为金属钌表面水分子分解提供了科学依据，解决了领域内的这一长期争议。研究发现：（1）核量子效应使质子发生离域，将质子转移能垒降低了近一半，极大促进了质子在水分子间的快速转移。相比之下，经典分子动力学模拟由于未考虑核量子效应，即使在微秒时间尺度内也未能观察到水的分解现象；（2）核量子效应驱动长程质子转移，水分子分解过程中质子转移跨越了多达 5 个水分子，形成“质子接力”式分解机制，与局域反应路径计算结果截然不同。该研究不仅解决了表面科学领域长期存在的争议，更揭示了核量子效应在质子转移动力学中的关键作用，为金属表面水吸附和水介导化学反应等研究开辟了新视角。

Z-P20**基于小体系采样的多主元合金机器学习势高效构建策略**

刘焱、刘培涛*

中国科学院金属研究所

多主元合金 (MPEAs) 性能优异、应用前景广阔，但其巨大的成分、组态和构型空间使得基于第一性原理计算构建高精度机器学习势 (MLP) 面临采样困难和计算成本高昂的严峻挑战。为应对这一挑战，本文提出一种高效构建 MPEA-MLP 训练数据集的新策略：仅需对包含最多 12 个原子的纯金属和二元合金小体系模型进行采样计算。为验证该策略的可行性，结合主成分分析与多种测试数据集的研究表明这种小体系采样方法足以充分覆盖典型 MPEA 的关键构型空间。相较于传统需直接对大型多元素超胞进行昂贵

采样的方法，该策略显著降低了数据生成成本。基于此策略构建的 MLP 在 TiZrVMo、Cantor (CrMnFeCoNi) 及 AlTiZrNbHfTa 等典型体系上展现出优异精度：能量预测的均方根误差 (RMSE) 低于 13 meV/atom，原子力预测 RMSE 低于 0.1 eV/Å。该方法可显著提升多主元合金材料中化学有序性的预测分析效率，加速研究大量化学计量体系中短程有序 (SRO) 的演变。本研究发展的策略为高效、精准构建复杂 MPEA 的机器学习势提供了有效途径，有力促进了此类材料大规模模拟驱动的性能预测与设计优化。

Z-P21

Determination of crystal structure and physical properties of Ru₂Al₅ from first-principles calculations

Jing Luo¹, Meiguang Zhang², Xiaofei Jia¹, Qun Wei^{*1}

1. Xidian University

2. Baoji University of Arts and Sciences

Novel ordered intermetallic compounds have stimulated much interest. Ru–Al alloys are a prominent class of high-temperature structural materials, but the experimentally reported crystal structure of the intermetallic Ru₂Al₅ phase remains elusive and debatable. To resolve this controversy, we extensively explored the crystal structures of Ru₂Al₅ using first-principles calculations combined with crystal structure prediction technique. Among the calculated X-ray diffraction patterns and lattice parameters of five candidate Ru₂Al₅ structures, those of the orthorhombic Pmmn structure best aligned with recent experimental results. The structural stabilities of the five Ru₂Al₅ structures were confirmed through formation energy, elastic constants, and phonon spectrum calculations. The mechanical and electronic properties of the five Ru₂Al₅ candidate structures were comprehensively analyzed. The brittle/ductile behavior, elastic anisotropy, and ionic bonding of each Ru₂Al₅ candidate structure were demonstrated through elastic and electronic structural calculations. This work can guide the exploration of novel ordered intermetallic compounds in Ru–Al alloys.

Z-P22

Design of Highly Selective and Sensitive Nitrogen-Containing Gas Sensor Based on Penta-HgO₂ Monolayer

Xinyu Song, Xing Ming*, Wen Lei, Bowen Chen, Xinyi Li, Jinpeng Wang, Ke Peng

Guilin University Of Technology

Reduction of the harmful effects of toxic gases on human health has attracted widespread attention in the scientific community. Design highly-sensitive and reusable sensors for detecting harmful gas molecules is particularly important. In this study, we use first-principles calculations to investigate the adsorption properties and sensing performances of the penta-HgO₂ monolayer for nitrogen-containing toxic gas molecules. The penta-HgO₂ monolayer exhibits substantial adsorption energies or notable charge transfer for NH₃, NO₂, and NO, significantly surpassing those of N₂O, indicating excellent selectivity. Specifically, the adsorption of NO₂ and NO introduces additional states near the Fermi level of the adsorbent, leading to pronounced changes in the band gap and magnetic moment. We further propose a strategy to predict the direction and extent of charge transfer, which will accelerate the screening of suitable substrates or candidate adsorbed gas molecules. In addition, based on the obvious variations of the electronic structure and resultant prominent changes in the conductivity of monolayer penta-HgO₂, we propose a resistive gas sensor featured with high-efficient sensing response for detecting NO₂ and NO. Furthermore, according to the significantly changing work functions, we design a Schottky diode sensor by fabricating the penta-HgO₂ monolayer with Ag metal. The metal-semiconductor contact types and barrier heights are modulated by the adsorption of NO₂ or NO. Different current signals can be generated when a bias voltage of 0.4 eV is applied, enabling the selective identification of NO₂ and NO. Our work not only demonstrates that monolayer penta-HgO₂ is a promising reusable sensing material, but also provides valuable insights for accelerating the discovery of potential sensing materials and developing advanced resistive sensor or Schottky diode sensor for detecting nitrogen-containing toxic gas molecules. The monolayer penta-HgO₂ is expected to promote innovative applications in sensor fields, which will attract widespread attentions.

Z-P23

金属粘度非阿伦尼乌斯跃变研究

王璐瑶*

山东大学

金属的粘度随温度变化一般符合阿伦尼乌斯公式。在铝、铅、钢等金属中，其粘度除符合阿伦尼乌斯公式外，还存在一些异常跃变。这些粘度的异常跃变可以解释为金属熔体微观结构的转变。在 wulff 团簇模型中，团簇的各表面面积占比随温度变化。当某些表面出现或消失时，因不同表面对游离原子的吸引力大小不同，熔体有序结构与无序结构之间的相互作用发生改变，粘度产生跃变。钢的 001 面在约 740K 时消失，这与钢在 700K 至 750K 时存在粘度非阿伦尼乌斯跃变相符。

Z-P24

块体 TiO₂ 压力驱动转化的深度学习分子动力学模拟

杜红伟、刘宇*

西北大学长安校区现代物理研究所

Accurate interatomic interaction potentials on the basis of deep-learning methods can provide new opportunities for molecular dynamics (MD) simulations on large spatial and temporal scales in the field of material phase transformation (PT). Here, we obtained a new interatomic interaction potential for bulk TiO₂ through deep-learning method trained on our theoretical calculations with density functional theory (DFT). Our MD simulations with deep-learning potential (DP) revealed that a large number of chiral quarter vortices emerge in the large bulk TiO₂ during martensitic-like columbite → baddeleyite and orthorhombic CaCl₂-type phase → baddeleyite PTs. Ti and O atoms move in a collective and synchronous order and then lead to Bain distortion in the central area between four different vortices. A certain shear stress (theoretically around 5.2 GPa) has to be provided to drive successfully the reverse PT of columbite → baddeleyite phase. The intermediate phase with orthorhombic CaCl₂-type symmetry (space group No. 58, Pnnm) appears under hydrostatic pressure with 7.6 GPa for rutile → baddeleyite PT. The PT path for intermediate phase → baddeleyite PT is nearly the same as that of columbite → baddeleyite PT. Our MD simulations with DP can provide a new understanding for martensitic-like PT behavior in large bulk materials and the ghostly existence of intermediate phase since 1971.

Z-P25

高温高压下 Mg₂SiO₄ 的生长动力学模拟研究

陈家立、胡俊伟、牛海洋*

西北工业大学

深入理解 Mg₂SiO₄ 在超级地球深层地幔的极端物理条件下的相变行为，对行星内部动力学演化与宜居性具有关键调控作用。本工作采用深度学习分子动力学模拟，系统研究了在 500~1300 GPa 压力下 Mg₂SiO₄ 后钙钛矿相 (post-post-perovskite, post-pPv) 的生长动力学过程。研究发现并证实，新生固相在全温压范围均处于阳离子无序状态，该现象与相生长速率变化无关；Mg₂SiO₄ 后钙钛矿相具有极高的生长速率，存在非单调的温度依赖性，压力增强会减慢生长速率。轨迹分析表明，极端压力导致 Mg/Si 阳离子配位环境趋同为相同的高配位数构型，削弱离子选择性差异，为理解超级地球内部物质状态提供关键理论数据。

Z-P26

基于机器学习的冰晶体结构识别序参量构建研究

任雨锋、牛海洋*、陈名毅、余耀辰、许晨涛

西北工业大学

结冰过程在自然界和工程中具有重要意义，广泛涉及气候演化、冷冻技术以及材料性能调控等多个领域。由于冰晶体结构多样，形成机制复杂，准确识别和分类不同冰相结构对于理解其相变行为至关重要。在分子动力学模拟中，受限于液固界面氢键网络的复杂性，传统结构分析方法难以准确判断局部结构状态。现有的序参量工具，如局域密度、四面体度与 Steinhardt 参数，在多晶型共存或结构过渡区域判别力有限，难以满足复杂体系中冰晶体识别的需求。

近年来，机器学习方法逐渐成为晶体结构识别的研究热点。主流模型分为两类：一类直接基于原子坐

标进行分类(如 DeepIce), 另一类则依赖多个结构序参量作为输入特征(如 LID 与 BOO 分类器)。然而, 前者计算代价高昂, 后者在结构判别准确率和泛化能力方面仍存不足。为此, 本文提出一种融合多种局部与拓扑结构信息的机器学习序参量构建方法。该方法基于多层感知机 (MLP), 整合了多种结构序参量、拓扑序参量等特征。模型在多种冰晶体与非晶样本上进行训练, 并在盲测数据集上验证其泛化能力。结果显示, 该模型可稳定识别多种晶相与非晶结构, 准确率高, 泛化能力强。本研究为开发通用的晶体结构识别工具提供了新思路。

Z-P27

Ultrahigh electron mobility in one-dimensional single-chain Bi₄RuX₂ (X = I, Br)

Xinyi Li, Xing Ming, Wen Lei*

Guilin University of Technology

Low dimensional materials usually bring about unique physical properties and exceptional phenomena. Beyond the highly sought-after two-dimensional materials, the quasi-one-dimensional (1D) materials have attracted increasing attention due to the further reduced dimensionality and the resultant more pronounced quantum confinement effect. In the present Letter, we systematically explore the stability, mechanical properties, electronic structure, and optical properties of the 1D single-chain ternary bismuth subhalides Bi₄RuX₂ (X = I, Br) by first-principles calculations. 1D Bi₄RuX₂ exhibit good dynamical, thermal, and mechanical stability. Along with the dimensionality reduction from three-dimensional bulk to 1D single-chain, Bi₄RuX₂ undergo a transition from the indirect bandgap semiconductor to direct bandgap semiconductor, and their bandgap values increase from 1.028 and 1.151 eV to 1.224 and 1.263 eV, respectively. More importantly, 1D Bi₄RuI₂ and Bi₄RuBr₂ possess very high electron mobilities of 416.25 and 277.17 cm² V⁻¹ s⁻¹, which far outperform the hole mobilities of 0.95 and 1.35 cm² V⁻¹ s⁻¹. In addition, the bandgap values and band edge positions can be effectively modulated by the tensile strains, which meet the conditions for photocatalytic water splitting during a wide strain range. Furthermore, the 1D Bi₄RuX₂ exhibit an excellent light absorption ability of ~105 cm⁻¹, which can be regulated by the tensile strain for the highly efficient utilization of solar energy. The excellent electronic and optical properties indicate 1D Bi₄RuX₂ are promising materials for potential applications in high-performance nanoelectronic, optoelectronic devices, photocatalytic water splitting, and solar energy conversion.

Z-P28

Design of High-Efficiency Hydrogen Evolution Catalysts in a Chiral Crystal

Jie Zhan¹, Yu Cao^{1,2}, Jun Wen Lai^{1,2}, Jiang Xu Li¹, Hui Ma^{1,2}, Song Li³, Pei Tao Liu^{1,2}, Xing-Qiu Chen^{1,2}, Yan Sun^{*1,2}

1. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences

2. School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology of China

3. School of Materials Science and Engineering, Northeastern University

The design of highly efficient hydrogen evolution reaction (HER) catalysts is one of the most important tasks for electrochemical water splitting in the field of renewable energy resources. In this work, via an effective combination of topologically trivial electronic intensity and the topologically nontrivial energy window, we predicted high catalytic performance in chiral material SiTc, with a close-to-zero hydrogen adsorption Gibbs free energy (-0.062 eV). With both a large intrinsic projected Berry phase and close-to-zero Gibbs free energy, SiTc provides a promising candidate for the HER catalysis reaction. In addition, this work offers an effective strategy for designing more potentially high activity topological electrocatalysts via the combination of topological states and high electronic intensity in metals.

Z-P29

一个通过光学光谱拟合晶体场哈密顿量的 python 程序

戚达炜*、邓水全

福建物质结构研究所

Computations based on crystal field theory are paramount for accurately simulating and understanding the

luminescent properties of rare-earth materials, which are critical for advanced optical applications. This approach demonstrates a significant advantage over traditional Density Functional Theory (DFT) calculations by achieving superior accuracy in reproducing experimentally observed energy levels. This work introduces a Python program designed to fit crystal field Hamiltonians to optical spectroscopy data of rare earth ions. The program first generates a canonical Hamiltonian based on the assumed site symmetry of the ion. It then employs a Monte Carlo search to explore all possible crystal field parameters, which represent the ligand's influence on the central ion, aiming to find the optimal set that reproduces the observed energy levels. Finally, a local optimization algorithm refines these results. PyCrystalField handles the evaluation and diagonalization of the Hamiltonian, utilizing our program's numerous built-in factors and information collected from various sources. Testing demonstrates that the program can reproduce observed rare earth energy levels with astounding accuracy. The accurately determined crystal field parameters offer profound insights into the local electronic structure and symmetry environment of the rare-earth ions, thereby providing crucial guidance for the rational design and discovery of novel high-performance luminescent materials.

基于晶体场理论的计算对于精确模拟和理解稀土发光材料的发光特性至关重要，这些材料在先进光学应用中扮演着关键角色。此计算方法在复现实验观测能级方面展现出超越传统密度泛函理论（DFT）计算的显著优势，实现了更高的准确性。本工作开发了一个用于通过光学光谱拟合晶体场哈密顿量的 python 程序。程序首先根据假定的稀土离子的位点对称性构建哈密顿量的形式。随后，它对所有可能的哈密顿量（反映了稀土离子所在的配位环境）进行了蒙特卡洛搜索以寻找最能够复现实验观察得到的能量的晶场参数。最后，程序通过局部优化算法进一步优化结果。哈密顿量的数值形式和特征值计算有 PyCrystalField 进行，使用了大量从各种来源收集的内置参数。测试表明，该程序能以惊人的准确度复现稀土离子的实验能量。精确拟合得到的晶体场参数能够深刻揭示稀土离子的局域电子结构和对称性环境，从而为新型高性能发光材料的理性设计与发现提供关键指导。

Z-P30

Microscopic Corrosion Behavior of the Interface Layer in Copper-Aluminum Laminated Composites and First-Principles Calculations

Shuang Li, Wenyan Wang*

Henan University of Science and Technology

In corrosive environments, copper-aluminum alloy laminated composites are susceptible to significant galvanic corrosion at the bonding interface due to the substantial electrochemical potential difference between copper and aluminum. This phenomenon severely restricts their long-term service performance. Computational materials science, particularly methods based on density functional theory (DFT), offers a novel perspective for elucidating the microscopic corrosion mechanisms of these materials. This study employs multi-scale computational methods to systematically investigate the bulk structure and surface characteristics of the most common intermetallic compounds (Al_2Cu , AlCu , Al_4Cu_9) at the interface of copper-aluminum laminated composites. Additionally, it examines the adsorption behavior of Cl^- at six typical adsorption sites on the $\text{Al}_2\text{Cu}(100)$ surface, aiming to uncover the initiation locations of inter-facial microscopic corrosion and the underlying driving forces of micro-galvanic corrosion. The findings indicate that the Al_2Cu layer is the first to undergo corrosion, acting as the "igniter" for corrosion initiation. In contrast, the AlCu layer, due to its weakened inter-granular structure, functions as the "accelerating channel" for corrosion propagation. The Al_4Cu_9 layer, through surface reconstruction and self-healing properties, serves as the ultimate "corrosion barrier." The strong electron transfer of Cl^- at the top and bridge sites of Al leads to the rapid anodic dissolution of Al, which is the primary driving force for the initiation of inter-facial corrosion. Furthermore, the adsorption of Cl^- on the $\text{Al}_2\text{Cu}(100)$ surface selectively triggers corrosion at Al vacancies and Cu vacancies through the electron defect effect and complex electron exchange mechanisms, respectively, by modulating the electron transfer kinetics and local electronic structure. The micro-galvanic cell effect creates potential differences between various sites, which in turn accelerates corrosion propagation and increases the dissolution rate of aluminum. This mechanism not only

provides direct evidence for understanding corrosion behavior at the interface layer but also offers a crucial theoretical foundation for designing corrosion-resistant copper-aluminum alloy layered composites and protective coatings. Such insights are significantly important for the development of new corrosion-resistant materials and the extension of their service life.

Z-P31

Pronounced Exciton Effects in Two-Dimensional Fullerene-based Monolayer Materials

Ning Li, Tianqi Bao

Dalian University of Technology

Two-dimensional (2D) fullerene monolayer materials exhibit a wide range of unique properties, including pronounced excitonic effect with significant potential for optoelectronic applications. Here, we perform a comprehensive investigation of the quasiparticle (QP) and exciton properties of C20-2D monolayer using density functional theory (DFT) and many-body perturbation theory (MBPT) based on the GW approximation and Bethe-Salpeter equation (GW-BSE). Our calculations reveal substantial exciton effects in the C20-2D monolayer, with an impressive exciton binding energy of 1.58 eV, a notable breakthrough compared to the 0.8 eV reported for the C60 monolayer. Embedding magnesium (Mg) into the C20-2D monolayer induces polarization effects and enhances dielectric screening, driving a transition of the lowest-energy excitons from Frenkel to Wannier types. This transition is accompanied by significant changes in both the intensity and range of optical absorption. These findings reveal the tunability of fullerene materials through embedding, offering insights for next-generation optoelectronic devices.

Z-P32

机器学习力场“算不准”怎么办？Li₇La₃Zr₂O₁₂ 体系中的经验教训之谈

严子韩、朱一舟*

西湖大学

近年来，机器学习力场逐渐成为在复杂材料中进行分子动力学模拟中的强大工具。其广受欢迎的原因在于，能够保持计算效率并实现接近从头算的精度。机器学习力场使得大规模、长时间、高精度分子动力学模拟成为可能，允许我们在原子尺度上直接研究复杂材料的性质。对于固态电解质材料，机器学习力场使我们能够直接研究相变行为和离子传输机制等关键性质，从而为这些材料提供新的理解。

然而，一个根本性的挑战依然存在：当基于机器学习力场的模拟结果不如人意时，如何确定这些差异究竟是源于力场训练的局限性，还是源于被忽视的物理机制？

在本次报告中，我将分享我们在 Li₇La₃Zr₂O₁₂ (LLZO) 固态电解质材料中使用机器学习力场进行模拟的经验和教训。我们发现，大多数用于力场训练的自动化迭代采样工作流程存在欠拟合短程原子间相互作用的风险，这可能导致长时间或大规模分子动力学模拟中发生灾难性的不符合物理原则的失败。我们证明了可以通过引入经验势来描述短程原子间相互作用，从而有效解决这一问题，确保训练出来的力场在长时间和大尺度的模拟中保持稳健的性能。而且，这种方法还可以大大加快力场的训练过程并降低计算成本。

此外，尽管在立方相 LLZO 中计算的扩散激活能与实验值吻合良好，但我们在四方相 LLZO 中却观察到显著差异。我们发现，与立方相不同，Li-O 肖特基对缺陷在四方相 LLZO 的离子扩散中起主导作用。即使锂含量的轻微非化学计量比也会对四方相 LLZO 的离子扩散产生显著影响。

我们在 LLZO 中应用机器学习力场进行 MD 模拟的成功与失败（尤其是失败）可能为社区提供宝贵的见解，为将机器学习力场扩展到其他复杂材料系统提供实践教训。

仅发表论文

Z-PO01

Monte Carlo Modeling of Electron Emission from Coated K₂CsSb Photocathodes

Tao Hou^{1,2,3}, Qiang Gu^{1,2}, Zeng Gong Jiang^{*2}

1. Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences

2. Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences

3. University of Chinese Academy of Sciences

Abstract: The photocathode serves as the core component of the electron source in accelerators, and its operational lifetime is critically important for the reliability of the entire accelerator system. Traditional photocathodes are susceptible to surface contamination, which leads to significant degradation in quantum efficiency (QE). Introducing a protective coating layer onto the photocathode surface offers a potential solution to extend its operational lifespan. However, there remains a lack of systematic research into how the introduction of such protective layers affects the photoelectron emission characteristics of the coated photocathodes. Based on Spicer's "three-step model" of photoemission, this work establishes a physical model for electron emission from coated photocathodes and develops a photoemission simulation algorithm using the Monte Carlo method.

Z-PO02

二氢化钛晶界中氢迁移的第一性原理研究

俞菲菲

成都理工大学

随着氢能技术的发展, 钛基氢化物因其优异的储氢性能而受到广泛关注。本文基于第一性原理计算, 系统研究了二氢化钛 (TiH_2) 中晶界结构与氢迁移行为之间的关系。选取了三种具有代表性的晶界取向: $\Sigma 3$ ($\bar{1}11$)、 $\Sigma 5$ (120) 和 $\Sigma 5$ (130), 分析其晶界能及结构稳定性, 结果表明 $\Sigma 3$ ($\bar{1}11$) 晶界具有最低的界面能, 稳定性最佳。在此基础上, 我们进一步考察了不同浓度氢空位在 $\Sigma 3$ ($\bar{1}11$) 晶界区域的聚集行为。结果显示, 氢空位倾向于在晶界区域聚集, 并存在一定的聚集上限, 形成稳定的缺陷结构。同时, 通过计算氢原子在晶界附近的扩散能垒, 发现其在晶界区域的扩散能垒显著低于体相, 表明晶界为氢扩散提供了快速通道。本研究揭示了晶界取向和氢空位构型对钛氢化物中氢扩散性能的关键影响, 为优化钛基储氢材料的微观结构设计和性能调控提供了理论支持。

Z-PO03

第一性原理计算研究 $\text{Mn}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ 的电子、磁学和光学性质

谷雨豪、郑冰*、陈民欢

北京理工大学

摘要: 本文采用基于密度泛函理论(DFT+U)的第一性原理计算方法, 对尖晶石体系 $\text{Mn}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x=0, 0.5, 1$) 进行了原子结构、电子结构、磁性能和光学性质研究。优化后的晶格参数与实验结果高度契合, 将优化后的结构用于自洽计算以得到上述性质。结果表明, 当 $x=1$ 时, NiFe_2O_4 晶格常数与磁矩最小, 随着锰的加入, 体系晶格膨胀, 总磁矩增加。此外还分析了三种体系的能带结构, 对 $\text{Mn}/\text{Ni}/\text{Fe}$ 采用的 U 值为 5.3 eV/5 eV/4.3 eV, 当 $x=0, 0.5, 1$ 时, 带隙分别为 1.21 eV、1.25 eV、1.66 eV, 初步研究结果将这三种材料归类为具有铁磁特性的半导体。态密度分析揭示了 Mn-O 、 Ni-O 和 Fe-O 之间的复杂化学相互作用, 随着锰的增加, Mn-3d 与 O-2p 之间的轨道杂化作用加强, 导致更多电荷发生转移, 形成非对称偶极子极化, 进而导致了电偶极矩的增加, 从而增强磁性。此外, 本文章还探讨了 $\text{Mn}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Fe}_2\text{O}_4$ 的光学性质, 为其在光电子学及储能领域的优化设计奠定了理论基础。

Z-PO04

Multi-physics simulation analysis of tunnel magnetoresistance multilayer stacks

Guanying Wang¹, Xianfeng Liang¹, Xingwang Zhang², Huaiwen Zheng^{*2}

1. China Electric Power Research Institute

2. Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Haidian, Beijing 100083, China.

In smart grids, magnetic sensors face reliability issues due to strong electromagnetic interference and high temperature environments. Tunnel magnetoresistance multilayer stacks, as the core sensitive materials of the magnetic sensors, have an important influence on the performance of magnetic sensors. Strong electromagnetic fields, temperature changes and other factors have a significant impact on the accuracy and life of magnetic sensors. Although researchers have previously conducted multi-physics field experimental studies on the tunnel magnetoresistance multilayer stacks, there are few reports on multi-physics field simulations of this material.

In this study, the finite element method was used to construct an electro-magnetic coupling model of a two-dimensional multilayer material system as the tunnel magnetoresistance multilayer stacks. The multilayer

system contains conductive metals (Ta, Pt) and magnetic alloys ($\text{Co}_2\text{Fe}_6\text{B}_2$). The response characteristics of the tunnel magnetoresistance multilayer stacks under strong electric and magnetic fields were analyzed. High magnetic permeability materials (Fe, $\text{Co}_2\text{Fe}_6\text{B}_2$) significantly enhance the magnetic flux density, while high dielectric constant materials (MgO) lead to local concentration of the electric field. At the same time, the changes in the electromagnetic properties of the multilayer material with temperature were also studied. This research provides a valuable reference for the optimization of tunnel magnetoresistance multilayer stack structure in smart grids.