

Z 材料模拟、计算与设计

时间：2021年7月9-11日

地点：海峡大剧院 233/236/237 会议室

厦门国际会展中心 C 馆 403 会议室

分会主席：

赵纪军	大连理工大学
刘利民	北京航空航天大学
陈星秋	中国科学院金属研究所
吕广宏	北京航空航天大学
陈时友	华东师范大学
张立军	吉林大学
管鹏飞	北京计算科学研究中心

联系人：

周思	大连理工大学
电话：13478612884	
邮箱：sizhou@dlut.edu.cn	

郭宇	大连理工大学
电话：13795165613	
邮箱：guoyu_dlut@dlut.edu.cn	

Z.材料模拟、计算与设计

分会主席：赵纪军、刘利民、陈星秋、吕广宏、陈时友、张立军、管鹏飞

单元 Z-1: 7月9日上午

主持人：吕劲、陆贇豪

地点：海峡大剧院 233 会议室

08:30-08:50 Z-12 (Invited)

二维材料中铁电序和磁序、拓扑序的耦合效应

陆贇豪

浙江大学

08:50-09:10 Z-13 (Invited)

插层构筑方法设计层状二维材料家族 MA_2Z_4 : 具有拓扑、磁性和超导等特性

王磊

中国科学院金属研究所

09:10-09:30 Z-14 (Invited)

AI 对 α -Ti 中位错滑移各向异性影响的第一原理研究

曹烁

中国科学院金属研究所

09:30-09:45 Z-15 (Oral)

二维磁性半导体磁性的增强

董雪娟

中国科学院物理研究所

09:45-10:15 茶歇

10:15-10:35 Z-16 (Invited)

二维材料晶体管中的肖特基势垒理论

吕劲

北京大学

10:35-10:55 Z-17 (Invited)

钙钛矿光生电荷动力学

龙闰

北京师范大学

10:55-11:15 Z-18 (Invited)

双层 MoS_2 摩尔超晶格结构中的强关联狄拉克费米子

康俊

北京计算科学研究中心

11:15-11:30 Z-19 (Oral)

寻找高迁移率二维半导体

程龙

湖南大学

11:30-11:45 Z-20 (Oral)

电场调控 $TcO_2/TiO_2(001)$ 异质结的电子结构和磁性

肖湘波

中国科学院物理研究所

11:45-13:30 午休

单元 Z-2: 7月9日下午

主持人：杨腾、程曦月

地点：海峡大剧院 233 会议室

13:30-13:50 Z-21 (Invited)

非线性光学原子响应理论在材料构效关系研究与设计中的应用

程曦月

中国科学院福建物质结构研究所

13:50-14:10 Z-22 (Invited)

周期性条件下的二维材料介电函数和光学性质计算方法和

应用

高尚鹏

复旦大学

14:10-14:30 Z-23 (Invited)

太赫兹光照下的材料相变

周健

西安交通大学

14:30-14:45 Z-24 (Oral)

有机磷光材料的理论模拟与分子设计

马会利

南京工业大学

14:45-15:00 Z-25 (Oral)

基于超薄二氧化铈可调控电子和光学特性的多体微扰理论研究

杨光

复旦大学

15:00-15:15 Z-26 (Oral)

有机钙钛矿 $MAPbI_3$ 中光增强离子扩散的起源

张才鑫

湖南大学

15:15-15:45 茶歇

15:45-16:05 Z-27 (Invited)

过渡金属硫化物中的共振拉曼散射过程

杨腾

中国科学院金属研究所

16:05-16:25 Z-28 (Invited)

层状材料 $SnSe$ 的动力学稳定性和晶格热导率的声子准粒子方法研究

鲁勇

北京化工大学

16:25-16:40 Z-29 (Oral)

一维原子碲链中巨大的 $Rahba$ 自旋轨道带劈裂

韩婕

吉林大学

16:40-16:55 Z-30 (Oral)

范德华力对辉碲铋矿族化合物声子输运性质的影响

李梦可

武汉大学

16:55-17:10 Z-31 (Oral)

$CH_3NH_3PbI_3/TiO_2$ 界面结构和光电性质的第一性原理研究

蒲文华

东北大学

17:10-17:25 Z-32 (Oral)

固体材料中的拓扑声子态

郑宝兵

宝鸡文理学院

17:25-17:40 Z-33 (Oral)

新型六方层状二元化合物材料的成键性质

孙安安

复旦大学

单元 Z-3: 7月9日上午

主持人：张妍宁、施思齐

地点：海峡大剧院 236 会议室

08:30-08:50 Z-34 (Invited)

基于电子调控策略设计高能量密度正极材料
施思齐
上海大学

08:50-09:10 Z-35 (Invited)

材料本征性质决定的表面稳定性和吸附特性：机理与应用
高旺
吉林大学

09:10-09:30 Z-36 (Invited)

新型二维纳米材料对生物分子吸附和结构的调控
李伟峰
山东大学

09:30-09:45 Z-37 (Oral)

二维拓扑材料 BP 作为离子电池负极材料的研究
孙文聪
东南大学

09:45-10:00 Z-38 (Oral)

快充型锂离子电池负极材料 $\text{Li}_{3+x}\text{V}_2\text{O}_5$ 的原子结构研究
石晶
中科院上海硅酸盐研究所

10:00-10:30 茶歇

10:30-10:50 Z-39 (Invited)

双齿配体对过渡金属氢氧化物析氧性能调控的理论研究
张妍宁
电子科技大学

10:50-11:10 Z-40 (Invited)

低碳烷烃催化转化过程的理论计算模拟
李波
中国科学院金属研究所

11:10-11:30 Z-41 (Invited)

制氢催化剂性能的理论解析及优化
甘立勇
重庆大学

11:30-11:45 Z-42 (Oral)

V 型纳米孪晶晶界对 RuO_2 基酸性电催化剂的 OER 性能调控机制
吴静静
桂林理工大学

11:45-12:00 Z-43 (Oral)

三元电子化合物 LaRuSi 催化合成氨内在机理研究
李洪晨
西北工业大学

12:00-13:30 午休

单元 Z-4: 7 月 9 日下午

主持人: 王毅、王海涛

地点: 海峡大剧院 236 会议室

13:30-13:45 Z-44 (Oral)

高容量电极材料中的超强电化学-力学耦合效应
杨辉
华中科技大学

13:45-14:00 Z-45 (Oral)

石墨烯负载 Pd 团簇对甲醛传感性能的第一原理研究
杨伦伟
北京有色金属研究总院

14:00-14:15 Z-46 (Oral)

表面氧空位改性对钨氧化物氢检测能力的影响机制研究
张芊
北京工业大学

14:15-14:30 Z-47 (Oral)

Mo_6S_{10} 纳米线的电子结构与锂离子电池储能性能的第一性原理研究
类淑来
湖北文理学院

14:30-14:45 Z-48 (Oral)

T-graphene: 一种可提供超容量的有前景的碱性离子电池负极材料
胡军平
南昌工程学院

14:45-15:00 Z-49 (Oral)

锂离子电池正极包覆材料的高通量计算筛选
刘波
井冈山大学

15:00-15:20 Z-50 (Invited)

高通量多尺度计算模拟
李玮琨
源资科技

15:20-15:45 茶歇

15:45-16:05 Z-51 (Invited)

先进轻质金属材料的集成计算材料工程示例研究
王毅
西北工业大学

16:05-16:25 Z-52 (Invited)

航空用钛铝合金裂纹形核扩展的集成计算设计
王峰
上海理工大学

16:25-16:45 Z-53 (Invited)

基于多物理场耦合方法的不锈钢暂态缝隙腐蚀仿真模拟
王海涛
中国科学院金属研究所

16:45-17:00 Z-54 (Oral)

可移植的机器学习模型高效预测合金吸附能
李昕
吉林大学

17:00-17:15 Z-55 (Oral)

基于介尺度模拟和深度学习的固体氧化物燃料电池(SOFC)电极宏观性能与微观结构的关系研究
刘徐昊
哈尔滨工业大学(深圳)

17:15-17:30 Z-56 (Oral)

{10-11}李晶界处裂纹扩展机制及其增韧机制
张灏
中南大学

17:30-17:45 Z-57 (Oral)

$\text{Fe-H}_2\text{O}$ 反应力场开发及金属铁在超临界水中的腐蚀机理研究
黄蕴
湖南大学

17:45-18:00 Z-58 (Oral)

含氢环境下裂尖位错发射的加载率依赖

赵凯
江南大学

单元 Z-5: 7月9日上午
主持人: 吴波、刘雄军
地点: 海峡大剧院 237 会议室

08:30-08:50 Z-59 (Invited)
TiZrHfNb 高熵合金的短程序效应: 第一性原理研究
刘雄军
北京科技大学

08:50-09:10 Z-60 (Invited)
金属过冷熔体中多晶相选择性形核的调控机制
安思敏
北京应用物理与计算数学研究所

09:10-09:30 Z-61 (Invited)
高熵合金的第一性原理计算研究
张华磊
西安交通大学

09:30-09:45 Z-62 (Oral)
HfNbTaTiZr 系高熵合金相分解及其强化效应的第一原理研究
陈树明
中国科学院金属研究所

09:45-10:15 茶歇

10:15-10:35 Z-63 (Invited)
CoCrFeMnNi 高熵合金的原子占位、晶格畸变、间隙原子扩散和表面性质的计算模拟
吴波
福州大学

10:35-10:55 Z-64 (Invited)
机器学习加速高熵合金相设计与力学性能优化
刘伟
南京理工大学

10:55-11:15 Z-65 (Invited)
氧缺陷增强阳离子非均一偏聚对 BaTi₂O₅ 熔体玻璃形成的抑制效应
胡侨丹
上海交通大学

11:15-11:30 Z-66 (Oral)
低维体系极化的研究
张春梅
西北大学物理学院

11:30-11:45 Z-67 (Oral)
合金化元素对 Sn-Bi 焊料封装过程中 Bi 偏析行为的影响机理研究
阎佳思
有研科技集团有限公司有色金属材料制备加工国家重点实验室

11:45-12:00 Z-68 (Oral)
二维 Janus 材料 SnXY (X, Y = O S Se) 稳定性的第一性原理研究
罗宇峰
武汉大学

12:00-13:30 午休

单元 Z-6: 7月9日下午
主持人: 许依春、牛晓滨
地点: 海峡大剧院 237 会议室

13:30-13:50 Z-69 (Invited)
二维材料及其异质结构的 CVD 生长机理研究
牛晓滨
电子科技大学

13:50-14:10 Z-70 (Invited)
单层 MoS₂ 化学气相沉积生长的理论研究
谢禹
吉林大学物理学院

14:10-14:25 Z-71 (Oral)
单壁碳纳米管手性控制生长的理论研究
王晓
中国科学院深圳先进技术研究院

14:25-14:40 Z-72 (Oral)
锡烯在 Cu(111)面上生长和相变的理论研究
吴曦
清华大学清华-伯克利深圳研究生院

14:40-14:55 Z-73 (Oral)
基于密度泛函理论的活性炭孔径分布改进算法比较
朱子文
集美大学轮机工程学院 福建省船舶与海洋工程重点实验室

14:55-15:10 Z-74 (Oral)
高性能碳纳米管纤维的跨尺度结构设计
王超
哈尔滨工业大学

15:10-15:40 茶歇

15:40-16:00 Z-75 (Invited)
辐照环境下铁基结构材料氧化腐蚀的模拟研究
许依春
中国科学院合肥物质科学研究院

16:00-16:20 Z-76 (Invited)
基于多尺度模拟的钨辐照硬化行为研究
王园园
大连理工大学

16:20-16:40 Z-77 (Invited)
氢致体心立方金属螺位错核心结构转变及其影响研究
李宇浩
北京航空航天大学

16:40-16:55 Z-78 (Oral)
碳纳米材料与金属的复合材料在聚变材料中的应用
魏国
武汉大学

16:55-17:10 Z-79 (Oral)
H 原子在 W/ZrC 界面处偏聚行为的第一性原理研究
张艳革
中国科学院合肥物质科学研究院

17:10-17:25 Z-80 (Oral)
核石墨的多晶建模及微裂纹的影响分析
熊东波
中国科学院上海应用物理研究所

17:25-17:40 Z-81 (Oral)
电流驱动的材料微观结构演化模型

王楠
广东以色列理工学院

17:40-17:55 Z-82 (Oral)

高温热电器件的界面稳定性研究：第一原理计算结合相图热力学

种晓宇
昆明理工大学

单元 Z-7：7 月 10 日上午

主持人：赵纪军

地点：厦门国际会展中心 403

08:30-09:05 Z-01 (Keynote)

半导体能带工程和缺陷调控在清洁能源领域的应用

魏苏淮
北京计算科学研究中心

09:05-09:40 Z-02 (Keynote)

Catalyst design for formic acid dehydrogenation

蒋青
吉林大学

09:40-10:15 Z-03 (Keynote)

界面催化的理论模拟

傅钢
厦门大学

10:15-10:45 茶歇

10:45-11:20 Z-04 (Keynote)

三维伊辛模型精确解以及计算复杂度

张志东
中国科学院金属研究所

11:20-11:55 Z-05 (Keynote)

Dual adaptive sampling and machine learning interatomic potentials for modeling materials with chemical bond hierarchy

张文清
南方科技大学

11:55-13:30 午休

单元 Z-8：7 月 10 日下午

主持人：赵纪军

地点：厦门国际会展中心 403

13:30-14:05 Z-06 (Keynote)

热-动力学相关性与金属材料非平衡相变

刘峰
西北工业大学

14:05-14:40 Z-07 (Keynote)

溶质元素对纳米晶合金体系热稳定性的界面调控机理研究

宋晓艳
北京工业大学

14:40-15:15 Z-08 (Keynote)

二维势垒位错滑移模型的建立及在不同键型晶体中的应用

温斌

燕山大学

15:15-15:45 茶歇

15:45-16:20 Z-09 (Keynote)

Encyclopedia of emergent particles in three-dimensional crystals

姚裕贵
北京理工大学

16:20-16:55 Z-10 (Keynote)

非线性光学晶体材料的原子响应理论及材料基因问题

邓水全
中国科学院福建物质结构研究所

16:55-17:30 Z-11 (Keynote)

三维量子霍尔效应

卢海舟
南方科技大学

单元 Z-9：7 月 11 日上午

主持人：陈明星、张朝阳

地点：海峡大剧院 233 会议室

08:30-08:50 Z-83 (Invited)

低感高能材料的设计策略

张朝阳
中国工程物理研究院化工材料研究所

08:50-09:10 Z-84 (Invited)

转角二维材料研究中的材料设计与模拟

洗乐德
松山湖材料实验室

09:10-09:30 Z-85 (Invited)

杂化钙钛矿中载流子非辐射复合的第一性原理研究

张燮
北京计算科学研究中心

09:30-09:50 Z-86 (Invited)

金属单质拓扑声子态

陈星秋
中国科学院金属研究所

9:50-10:20 茶歇

10:20-10:40 Z-87 (Invited)

本征磁性拓扑绝缘体中的表面能隙及反常霍尔效应研究

刘奇航
南方科学技术大学

10:40-11:00 Z-88 (Invited)

过渡金属硫族化合物单层/二维磁性半导体范德华异质结中的自旋/能谷过滤及阀效应

陈明星
湖南师范大学

11:00-11:20 Z-89 (Invited)

二维材料中新奇能谷物理的理论探索

马衍东
山东大学

11:20-11:40 Z-90 (Invited)

拓扑材料的理论设计及其外场响应

王锐
重庆大学

11:40-11:55 Z-91 (Oral)

BiSbTe₃: 具有双重拓扑特性的外尔半金属

周宇楨
重庆大学

11:55-13:30 午休

单元 Z-10: 7 月 11 日下午
主持人: 卢海燕、孙建
地点: 海峡大剧院 233 会议室

13:30-13:50 Z-92 (Invited)

高压下的新奇物态
孙建
南京大学

13:50-14:10 Z-93 (Invited)

压力诱导稳定的超导化合物研究
杨国春
东北师范大学

14:10-14:30 Z-94 (Invited)

Prediction of high-Tc superconductivity in ternary lanthanum borohydrides
高国英
燕山大学

14:30-14:50 Z-95 (Invited)

高压下氢纳米管结构的 Hf-H 超导材料的设计
李印威
江苏师范大学

14:50-15:10 Z-96 (Invited)

高压超导富氢材料的理论设计
刘寒雨
吉林大学

15:10-15:25 Z-97 (Oral)

高压下笼型硼化物的结构和性质研究
徐美玲
江苏师范大学

15:25-15:55 茶歇

15:55-16:15 Z-98 (Invited)

金属 Pu 及 Pu 基化合物的 5f 电子特性研究
卢海燕
中国工程物理研究院材料研究所

16:15-16:35 Z-99 (Invited)

相对论能带理论与重元素材料计算
赵润东
北京航空航天大学

16:35-16:55 Z-100 (Invited)

f 电子对化合物的结构和性质的决定机制
胡淑贤
北京科技大学

16:55-17:10 Z-101 (Oral)

金属材料原子间作用势构建方法与应用
林德焯
中物院高性能数值模拟软件中心

17:10-17:25 Z-102 (Oral)

金属玻璃力学性能的分子动力学研究
蔡蓓
清华大学

17:30 会议闭幕和颁奖 (地点: 海峡大剧院 233 会议室)

单元 Z-11: 7 月 11 日上午

主持人: 李晓娜、邹小龙
地点: 海峡大剧院 236 会议室

08:30-08:50 Z-103 (Invited)

基于机器学习的 CO₂ 还原铜基单原子合金催化剂的理论研究
邹小龙
清华-伯克利深圳学院

08:50-09:10 Z-104 (Invited)

利用人工智能的可解释性揭示物质的复杂相变机制
宗洪祥
西安交通大学

09:10-09:30 Z-105 (Invited)

基于人工智能的晶体结构预测方法和计算软件
王宗国
中国科学院计算机网络信息中心

09:30-09:45 Z-106 (Oral)

基于机器学习的 Mn-Fe-P-Si 合金磁热性能的加速设计
涂德芳
上海交通大学

09:45-10:00 Z-107 (Oral)

递归神经网络加速第一性原理分子动力学模拟进程
汪嘉琪
西湖大学

10:00-10:15 Z-108 (Oral)

MDanalysis:面向大规模分子动力学模拟的可扩展数据分析算法研究、软件研制及其应用
吴国清
北京应用物理与计算数学研究所

10:15-10:45 茶歇

10:45-11:05 Z-109 (Invited)

基于稳定固溶体团簇模型的 Cu-Ni-Sn 合金成分解析及设计
李晓娜
大连理工大学

11:05-11:25 Z-110 (Invited)

Sn 基二元共晶点的近程序结构及钎料成分解析
董丹丹
大连大学

11:25-11:40 Z-111 (Oral)

从化学短程序到固溶体合金的成分设计
李壮
大连理工大学

11:40-11:55 Z-112 (Oral)

合金凝固过程溶质微观偏析再认识和新模型
巩桐兆
中国科学院金属研究所

11:55-13:30 午休

单元 Z-12: 7 月 11 日下午

主持人: 王栋、陈云
地点: 海峡大剧院 236 会议室

13:30-13:50 Z-113 (Invited)

合金凝固过程组织演化的多场耦合计算模拟
陈云
中国科学院金属研究所

13:50-14:10 Z-114 (Invited)

铁电多层膜中通量全闭合畴结构的相场模拟研究
王宇佳
中国科学院金属研究所

14:10-14:25 Z-115 (Oral)
变形诱发钢铁材料中马氏体相变的分子动力学模拟研究
欧小琴
中南大学

14:25-14:40 Z-116 (Oral)
纳米线生长与结构转变的相场模型
王衍明
上海交通大学

14:40-14:55 Z-117 (Oral)
基于相图计算方法的新型 U_3Si_2 基事故容错型核燃料的研究
袁媛
宁波材料技术与工程研究所

14:55-15:10 Z-118 (Oral)
二氧化钛金红石相, 钨铁矿相和斜锆石相之间的类马氏体相变研究
王文轩
西北大学

15:10-15:40 茶歇

15:40-16:00 Z-119 (Invited)
相场动力学模拟辅助钛合金微观组织设计
王栋
西安交通大学

16:00-16:20 Z-120 (Invited)
 $BiVO_4$ 相变的理论计算研究
刘太丰
河南大学

16:20-16:35 Z-121 (Oral)
分子动力学模拟揭示 AlN 非晶化机制及对相变的影响
张志波
广东省科学院新材料研究所

16:35-16:50 Z-122 (Oral)
选区激光熔化成型 IN718 合金热处理过程相场法模拟
陈苗苗
北京科技大学

16:50-17:05 Z-123 (Oral)
铋改性 AZ 系镁合金相图热力学研究及其在凝固微结构调控中的应用
汤颖
河北工业大学

17:05-17:20 Z-124 (Oral)
CALPHAD 技术在 Co 基粘结层合金制备中的应用
储茂友
有研资源环境研究院(北京)有限公司

17:30 会议闭幕和颁奖 (地点: 海峡大剧院 233 会议室)

单元 Z-13: 7 月 11 日上午
主持人: 丁俊、谢红献
地点: 海峡大剧院 237 会议室

8:30-8:50 Z-125 (Invited)
揭开面心立方金属中非切变孪晶的驱动力之谜
谢红献
河北工业大学

8:50-9:10 Z-126 (Invited)
极化金属与掺杂铁电材料的第一性原理研究

陈航晖
上海纽约大学

9:10-9:25 Z-127 (Oral)
 β -TiMo 合金{112}<111>滑移系中全滑移和孪晶的竞争关系
张雪纯
中国科学院金属研究所

9:25-9:40 Z-128 (Oral)
基于多尺度晶体塑性有限元方法探究 Ti-5.5Mo-7.2Al-4.5Zr-2.6Sn-2.1Cr 合金冷轧过程中的织构演变和滑移模式
王朵朵
北京理工大学

9:40-9:55 Z-129 (Oral)
铸态钛合金 Ti2531 准静态单轴拉伸损伤及失效过程的仿真研究
贡海超
北京理工大学

9:55-10:25 茶歇

10:25-10:45 Z-130 (Invited)
非晶态材料的拉压不对称性的微观机制
丁俊
西安交通大学

10:45-11:05 Z-131 (Invited)
液相金属界面应力的计算研究
杨洋
华东师范大学

11:05-11:20 Z-132 (Oral)
残余热应力对不同粒径金属陶瓷力学性能的影响
陈静洪
北京工业大学

11:20-11:35 Z-133 (Oral)
钢中奥氏体取向相关力学稳定性的晶体塑性研究
贾春妮
中国科学院金属研究所

11:35-11:50 Z-134 (Oral)
B2 金属间化合物中超螺位错分解与运动的分子动力学模拟计算
杨金波
中国科学院金属研究所

11:50-12:05 Z-135 (Oral)
COF 材料的抗冲击性能及破坏机理研究
郝维哲
哈尔滨工业大学

12:05-13:30 午休

单元 Z-14: 7 月 11 日下午
主持人: 柯小琴、王云江
地点: 海峡大剧院 237 会议室

13:30-13:50 Z-136 (Invited)
金属材料塑性加速分子动力学模拟
王云江
中国科学院力学研究所

13:50-14:10 Z-137 (Invited)
 γ -TiAl 形变中成键变化和 Nb 对位错分解的影响
王昊
上海大学

14:10-14:30 Z-138 (Invited)

铁电准同型相界处的极化调幅分解机制

柯小琴

西安交通大学

14:30-14:45 Z-139 (Oral)

7055 铝合金 Johnson-Cook 本构方程的构建与应用研究

李明阳

北京有色金属研究总院

14:45-15:00 Z-140 (Oral)

溶质捕获氢对金属铝氢脆机制影响的理论研究

李媛媛

上海交通大学

15:00-15:15 Z-141 (Oral)

第一原理计算研究石墨烯/Al 复合材料界面的点缺陷强化机理

张欣

中国科学院金属研究所

15:15-15:45 茶歇

15:45-16:00 Z-142 (Oral)

氧化物玻璃表面的纳米尺度特征研究

张真

西安交通大学

16:00-16:15 Z-143 (Oral)

高温下 β -钛晶界能的分子动力学计算

何红

中国科学院金属研究所

16:15-16:30 Z-144 (Oral)

氢原子在 α -Ti 表面及近表面行为的第一性原理研究

王超明

中国科学院金属研究所

16:30-16:45 Z-145 (Oral)

纯钛 α/β 半共格相界面结构和迁移的分子动力学模拟

张金字

清华大学

16:45-17:00 Z-146 (Oral)

$\text{Ni}_{75}\text{Al}_{18}\text{Cr}_7$ 高温合金 L12 相间界面性能的微观相场法研究

董卫平

浙江师范大学

17:00-17:15 Z-147 (Oral)

二维褶皱结构中的电控谷极化

孙瑜

湖南大学

17:30 会议闭幕和颁奖（地点：海峡大剧院 233 会议室）

墙报

Z-P01

钢系氧化物中杂质效应的理论研究

丁茜

中国工程物理研究院材料研究所

Z-P02

Sn-Au 二元合金共晶点的双团簇模型及钎料成分解析

曹志明

大连大学

Z-P03

稀土钨酸盐高温热膨胀性能第一性原理研究

王星奇

有研科技集团有限公司 生物冶金国家工程实验室

Z-P04

二维 MnN: 高容量锂离子电池负极

胡军平

南昌工程学院

Z-P05

$\text{LiAl}(\text{NH}_2)_4$ 氢化物及其掺杂体系作为转换反应型储钠/钾材料的第一性原理设计

钱钊

山东大学

Z-P06

镁合金第二相颗粒临界钉扎尺寸的相场法模拟研究

吴艳

武汉轻工大学

Z-P07

第一性原理研究二元钛合金中的模量强化

程坤

中国科学院金属研究所

Z-P08

B 在 Ni 中扩散的第一性原理研究

顾颖

北京科技大学

Z-P09

Al-Er-Zr 三元系的 673 和 873 K 相平衡及凝固路径研究

刘晓旭

中南大学

Z-P10

亚十纳米双层碲烯晶体管的第一性原理量子输运模拟研究

李秋卉

北京大学

Z-P11

层状材料 SnSe 的电子结构和声子输运性质的理论计算研究

薛峰宁

北京化工大学

Z-P12

第一性原理计算在锂离子电池电极材料研究中的应用

杨晨

北京大学

Z-P13

压力作用下卤化物钙钛矿 CsPbX_3 (X = I, Br, Cl) 的结构和电子性质研究

王歆钰

南京大学

Z-P14

铁电/铁磁范德华异质结中自旋相关的电子结构和电输运性质的电场调控

包恒星

南京大学

Z-P15

虚拟孔洞法生成低密度微孔碳结构的分子动力学模拟

罗智分

西北工业大学

- Z-P16**
高居里温度的铁磁性金属:Janus Mn₂PA_s 单层膜
曾航航
西北工业大学
- Z-P17**
基于有序硼-磷双掺杂的石墨烯狄拉克拓扑能带调控
孟令彪
中国工程物理研究院 激光聚变研究中心
- Z-P18**
合金元素对 Pt 基高温合金中 γ 相热力学性质的影响
余威、种晓宇*、周云轩、干梦迪、林洋、冯晶
昆明理工大学
- Z-P19**
高通量计算 RE₂TaO₄ (RE=Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er) 的热物理性能
干梦迪
昆明理工大学
- Z-P20**
基于第一性原理的非化学计量比 VC_{1-x} 的热物性研究
林洋
昆明理工大学
- Z-P21**
直接巯基功能化 COFs 材料的结构解析及用于水中重金属的去除
张百超
中国地质大学(北京)
- Z-P22**
稀土钨阴极材料的第一性原理研究
黄文奕
北京科技大学
- Z-P23**
原子模拟金属钽中孪晶在不同晶粒取向差下的穿晶行为
孟智超
中国科学院金属研究所
- Z-P24**
Mg-Al-Zn 合金的 ϕ 相热力学研究
栗周
哈尔滨工业大学(深圳)
- Z-P25**
Fe 基合金液态微观结构演化的第一性原理计算
徐闯
中国科学院金属研究所
- Z-P26**
ZrC 晶体中 He、Ne、Ar、Kr 的行为
孙丹
中国核动力研究设计院
- Z-P27**
新型二维含平面六配位碳结构材料的理论研究
杨晓新
中国科学院深圳先进技术研究院
- Z-P28**
Ni-Sn 体系的热力学优化
廖林
中南大学
- Z-P29**
神经网络在钙钛矿构效关系中的应用
郭佳龙
中国科学院计算机网络信息中心
- Z-P30**
Pd-Nb 二元体系的结构预测及力学性质研究
刘鸣凤
中科院金属所
- Z-P31**
第一原理计算研究非金属间隙原子对钛合金相稳定性的影响
杨梦梦
上海理工大学
- Z-P32**
二维 ReS₂ 晶界磁性的理论研究
吴常伟
中国科学院深圳先进技术研究院
- Z-P33**
电子束增材制造多孔网格 Ti-6Al-4V 合金的有限元分析
王源康
烟台大学精准材料高等研究院
- Z-P34**
应变对 GaN/AlN 异质界面中本征点缺陷的影响
杨玉明
中国科学院合肥物质科学研究院
- Z-P35**
基于团簇展开方法的 Ni-Al-Re 三元合金的组态熵的研究
朱鹤雨
中国科学院金属研究所
- Z-P36**
单晶 BiFeO₃-BaTiO₃ 固溶体的热力学相图
胡馨月
厦门工学院
- Z-P37**
Fe 变形机制的分子动力学模拟研究
杨洋
中南大学
- Z-P38**
关于时变物理系统中时间序列智能生成与材料逆向设计的模式识别研究
梁超
中山大学
- Z-P39**
非金属催化剂用于高效一氧化氮还原产氨
吴倩
山东大学中心校区
- Z-P40**
钽对钨中嬗变元素铈聚集析出的影响机理研究
杨天任
北京航空航天大学
- Z-P41**
基于特殊准随机结构(SQS)的第一性原理计算建模 SaaS 化及其应用
朱冬
中科院计算机网络信息中心

Z-P42

铍对钨中氮溶解和聚集行为的影响研究

李金梁

北京航空航天大学

Z-P43

新型高能量密度超硬材料 BN_2 的结构设计

张逸铭

江苏师范大学

Z-P44

石墨/六方氮化硼超晶格结构的理论测定

高琦

燕山大学

Z-P45

缺陷优化二维磷烯光生载流子寿命

裴玮

大连理工大学

Z-P46

NaB_6 的结构稳定性、电子性质和超导性质的第一性原理计算

袁智康

燕山大学

Z-P47

辐照下半导体深能级缺陷标定的多尺度模拟

刘俊

中国科学院固体物理研究所

Z-P48

中子辐照 4H-SiC 中深能级缺陷产生演化的多尺度模拟

高扬

中国科学院固体物理研究所

Z-P49

NiCo 合金纳米板剪切变形力学性能的分子动力学模拟研究

郜清

兰州理工大学

Z-P50

基于晶体塑性理论的镍基高温合金纳米压痕残余拓扑形貌机制研究

李凯迪

Z-P51

钛铝合金中 γ/γ' 界面类型选择及其力学性能评估

张金虎

中国科学院金属研究所