



2021

第十三届计算纳米科学与 新能源材料国际研讨会

THE 13TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTATIONAL NANOSCIENCE AND NEW ENERGY MATERIALS, CNNEM2021

会议手册

主办单位：内蒙古大学物理科学与技术学院
内蒙古自治区物理学会

中国·呼和浩特 7月20日-24日

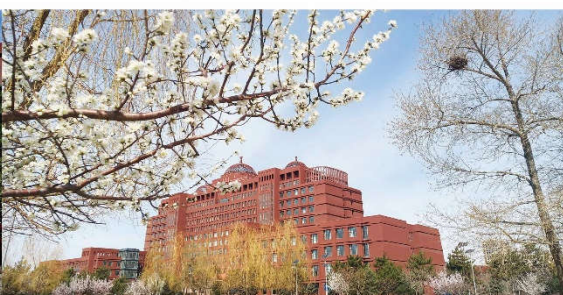


简介

Introduction

内蒙古大学位于内蒙古自治区首府、历史文化名城呼和浩特市，成立于1957年。1978年被确定为全国重点大学，1984年获博士学位授予权，1997年被批准为国家“211工程”重点建设院校，2004年成为内蒙古自治区政府和教育部“省部共建”大学，2012年入选国家“中西部高校提升综合实力计划”高校（“一省一校”），2016年被内蒙古自治区政府确定为“双一流”建设首选支持高校，2017年入选国家一流学科建设高校，2018年成为教育部和内蒙古自治区合建高校。

内蒙古大学物理科学与技术学院成立于2008年3月,前身是创建于1957年的内蒙古大学物理学系,是内蒙古大学建校成立的最早的系之一。学院拥有物理学一级学科博士、硕士学位授权点,物理学一级学科博士后工作流动站;物理电子学硕士学位授权点(工科),电子信息专业硕士学位授权点。理论物理学、凝聚态物理学和生物物理学为自治区重点学科。学院始终坚持教学、科研并重的办学原则,在基础、交叉和应用基础科学研究等方面取得了突出的成绩。现有4个自治区重点实验室:半导体光伏技术实验室、离子束生物工程实验室、纳米科学与技术实验室、稀土材料物理与化学实验室。近五年来,原创性成果在PRL、PRB、Adv. Energy. Mater.等期刊发表论文289篇,新增科研项目114项,其中国家自然科学基金47项,总经费达3400余万元。获多项成果获自治区自然科学奖、中青年科学技术创新奖,获批国家专利14项,出版学术专著1部。



会议介绍

计算纳米科学与新能源材料国际研讨会 (CNNEM) 始于 2008 年, 已经连续成功举办 12 届。2020 年, 该会议受新冠疫情影响首次在线上举办 (由大连理工大学和内蒙古大学联合举办)。前 12 届分别在南开大学、大连理工大学、山东大学/泰山学院、西南交通大学、烟台大学、哈尔滨师范大学、南京师范大学、北京计算科学研究中心、上海大学、吉首大学/湘潭大学、河南师范大学和山东大学/苏州大学成功举办。本届会议由内蒙古大学物理科学与技术学院承办, 会议包含基础前沿讲座 (60 分钟)、主题报告 (30 分钟)、邀请报告 (20 分钟)、口头报告 (15 分钟) 和学生报告 (10 分钟) 等环节, 采用线下会议与线上会议结合的方式, 将为计算纳米科学与新能源材料领域的最新发现与进展提供一个展示和研讨的国际平台。

CNNEM2021 会议名誉主席: 王广厚 院士

CNNEM2021 会议主席: 宫箭

CNNEM2021 会议学术顾问 (按姓氏首字母排序):

陈刚、陈中方、戴振宏、邓伟侨、丁峰、丁益宏、韩克利、李锋钰、李亚飞、李有勇、李震宇、刘利民、刘轶、刘智攀、马琰铭、彭金璋、孙立忠、孙强、孙长庆、王红艳、杨宗献、尹利长、张瑞勤、赵纪军、赵景祥、赵明文、周震

CNNEM2021 会议组织委员会 (按姓氏首字母排序):

崔鑫、宫箭、郭少强、李锋钰、刘志锋、吕娟、宋铁磊、王舒东、张海山、赵国军、赵忠龙

CNNEM2021 会议网站: <https://CNNEM2021.scimeeting.cn>

CNNEM2021 会议赞助单位:

- 北京华信鼎成科技有限公司
- 北京龙讯旷腾科技有限公司
- 江苏泓哲信越信息技术有限公司
- 上海超算科技有限公司
- 山东正云信息科技有限公司
- 费米科技 (北京) 有限公司
- 鸿之微科技 (上海) 股份有限公司

参会须知

➤ **报到注册:**

联系人: 李锋钰 15598204061, 刘志锋 13404816634

7月20日 8:00-22:00, 乌澜大酒店一楼大厅

7月21-23日 8:00-21:00, 会展中心女神大酒店一楼

➤ **注册费:** 现场缴费, 教师代表 2400 元, 研究生 1600 元。开具发票请提供抬头和纳税人识别号等。电子发票将于会议结束后发到相应邮箱, 纸质发票将于会议期间发放或会后邮寄。

➤ **会议住宿:** 乌澜大酒店、美渡酒店、世和大酒店、雅斯顿酒店

➤ **会议用餐:** 午餐和晚餐均在女神大酒店, 凭餐券用餐。若对饮食有特殊要求者, 请提前 3 天与会务组联系。

➤ **代表证:** 出入会场请佩戴会议代表证。

➤ **会议报告:** 会议开始前 20 分钟请报告人拷贝报告 ppt。使用自己电脑的报告人请提前测试投影设备的链接和显示。报告中屏幕会有时间提示, 请主持人和报告人控制好报告时间。

➤ **20 日交通安排:**

8:00-22:00, 每隔 1~1.5 小时有一次会议专用车到白塔机场和呼和浩特东站接送参会人员到乌澜大酒店报到。

➤ **寇享学术平台直播二维码:**



会议日程

总体概览:

日期	时间	活动	地点		
7月20日	08:00 - 21:00	报到注册	乌澜大大酒店一楼大厅		
7月21日	08:00 - 08:40	开幕式、合影	女神大酒店千人厅		
	08:40 - 12:00	学术报告 (大会会场)		女神大酒店千人厅	
	13:00 - 16:30				海报评选
	16:30 - 18:00	海报评选			
7月22日	08:00 - 12:00		学术报告 (分会场一)		女神大酒店千人厅
	13:00 - 18:30	学术报告 (分会场二)		女神大酒店阳光厅	
	19:30 - 21:00				
	08:00 - 12:00		学术报告 (分会场二)		女神大酒店阳光厅
	13:00 - 18:30	学术报告 (分会场三)		女神大酒店如意厅	
	19:30 - 21:00				
	08:00 - 12:00		学术报告 (分会场一)		女神大酒店千人厅
	13:00 - 18:00	学术报告 (分会场二)		女神大酒店阳光厅	
	19:30 - 21:00				
7月23日	8:00 - 12:00		学术报告 (分会场一)		女神大酒店千人厅
	13:00 - 18:00	学术报告 (分会场二)		女神大酒店阳光厅	
	08:00 - 12:00		学术报告 (分会场二)		女神大酒店阳光厅
	13:00 - 18:00	学术报告 (分会场三)		女神大酒店如意厅	
	08:00 - 12:00		学术报告 (分会场三)		女神大酒店如意厅
	13:00 - 18:00	闭幕式, 优秀墙报、学生报告颁奖		女神大酒店千人厅	
	18:00 - 18:30		闭幕式, 优秀墙报、学生报告颁奖		女神大酒店千人厅

7 月 21 日，星期三
(Wed., Jul. 21)

7月21日，星期三（Wed., Jul. 21）

大会会场，主持人：宫箭（内蒙古物理学会秘书长），地点：女神大酒店千人厅

08:00-08:40	会议开幕式 内蒙古大学校长致欢迎辞 会议荣誉主席王广厚院士致辞 合影
-------------	---

大会会场，主持人：赵纪军，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
08:40-09:10	K001	Band Structure Engineering and Defect Control for Energy and Optoelectronic Applications	魏苏淮	北京计算科学研究中心
09:10-09:40	K002	Encyclopedia of emergent particles in three-dimensional crystals	姚裕贵	北京理工大学
09:40-10:00	茶歇			

大会会场，主持人：魏苏淮，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
10:00-10:30	K003	Recent advances in penta-graphene and pentagon-based 2D materials	王 前	北京大学
10:30-11:00	K004	低维量子材料及其异质结的理论设计	杜世萱	中国科学院物理研究所
11:00-11:30	K005	硅基发光理论	骆军委	中国科学院半导体研究所
11:30-12:00	K006	新型二维铁磁材料的设计与调控	赵纪军	大连理工大学
12:00-13:00	午餐			

大会会场，主持人：李锋钰，地点：女神大酒店千人厅

13:00-13:50	PL01	Interplay of Experiment, Theory and Computation in Modern Chemistry	李 隽	清华大学
-------------	------	---	-----	------

大会会场，主持人：徐昕，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
14:00-14:30	K007	Rational design and fabrications of nanomaterials	马 晶	南京大学
14:30-15:00	K008	单原子电催化剂的理论设计与合成	曹达鹏	北京化工大学
15:00-15:30	K009	表界面催化氧化的理论研究	傅 钢	厦门大学
15:30-16:00	K010	稀土二氧化铈催化材料研究进展	龚学庆	华东理工大学
16:00-16:30	K011	Bridging Experiments and Computations for Electro/Photocatalysis via 2D Materials	周 震	郑州大学
16:30-18:00	茶歇、海报评选（阳光厅）			
18:00	主持人：赵国军 晚宴（千人厅）			

7 月 22 日，星期四
(**Thur., Jul. 22**)

7月22日，星期四（Thur., Jul. 22）

分会场一，主持人：李隽，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
08:00-08:30	K012	甲酸脱氢催化剂设计	蒋青	吉林大学
08:30-08:50	I001	金属团簇及其反应性的实验与理论研究	骆智训	中国科学院化学研究所
08:50-09:10	I002	Towards computational design of chemical reactions with reaction phase diagram	肖建平	中国科学院大连化学物理研究所
09:10-09:30	I003	优异电催化材料的高通量计算与筛选	王璐	苏州大学功能纳米与软物质研究院
09:30-9:50	I004	二维材料设计及电催化机理研究	杨利明	华中科技大学
09:50-10:05	O001	PWmat 在纳米、能源材料计算中的应用	田洪镇	北京龙讯旷腾科技有限公司
10:05-10:20	茶歇			

分会场一，主持人：傅钢，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
10:20-10:40	I005	中性团簇红外光谱研究	江凌	大连化学物理研究所
10:40-11:00	I006	应力对材料体系结构和析氢催化性能的调控	陈巍	福建师范大学
11:00-11:20	I007	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
11:20-11:40	I008	二维材料预测及其在能源和催化的应用	何朝政	西安工业大学
11:40-12:00	I009	CNMGE 高通量材料计算平台与材料大数据应用管理系统	李庚	国家超级计算天津中心
12:00-13:00	午餐			

大会会场，主持人：刘志锋，地点：女神大酒店千人厅

13:00-13:50	PL02	XYG3 形双杂化泛函：从分子到材料	徐 昕	复旦大学
-------------	------	--------------------	-----	------

分会场一，主持人：丁益宏，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
14:00-14:20	I010	反应环境中的纳米材料原位可塑性	朱倍恩	中国科学院 上海高等研究 院
14:20-14:40	I011	低维材料的活性和光生载流子动力学 性质的优化调控	周 思	大连理工大 学
14:40-15:00	I012	基于固态储能应用的低维材料理论设 计与性质研究	王维华	南开大学
15:00-15:20	I013	Reversible cycling of graphite electrode in propylene carbonate electrolyte enabled by ethyl isothiocyanate	郭丽敏	吉林工程技 术师范学院
15:20-15:40	I014	高效 MOF 光催化材料的理论预测	吴新平	华东理工大 学
15:40-16:00	I015	理论设计和靶向合成无金属二维 C ₄ N-COF 光电催化 OER 催化剂	杨照地	哈尔滨理工 大学
16:05-16:20	茶歇			

分会场一，主持人：裴勇，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
16:20-16:40	I016	Activity of nanomaterials in catalytically tuning reactive oxygen species	高兴发	国家纳米科 学中心
16:40-17:00	I017	华信鼎成 HPC 解决方案及产品介绍	闫俊丽	北京华信鼎 成科技有限 公司
17:00-17:20	I018	相变参与的铁掺杂磷化镍的高效水的 全分解反应的密度泛函研究	徐 来	苏州大学
17:20-17:40	I019	复合催化剂的理论研究	谭 婷	国家纳米科 学中心
17:40-18:00	I020	基于图注意力网络的团簇性质预测	赛琳伟	河海大学
18:00-18:15	O002	基于密度泛函方法的锂硫电池催化材 料理论研究	张 琪	合肥工业大 学

18:15-18:30	O003	Machine learning and Simple descriptors for high activity and selectivity bimetallic atomic catalysts towards CO ₂ RR	姚 赛	南开大学
18:30	晚餐			

(学生报告专场) 分会场一, 主持人: 龙闰、吴梦昊, 地点: 女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
19:30-19:40	S001	钙钛矿光生载流子动力学理论计算	乔 璐	北京师范大学
19:40-19:50	S002	双层 MBi ₂ Te ₄ (M = Ge, Sn, Pb) 中层堆叠方式决定的拓扑相	彭 瑞	山东大学
19:50-20:00	S003	双层晶格中的铁弹-铁电多铁	张 婷	山东大学
20:00-20:10	S004	磁方向控制的单层铁磁 NpSb 拓扑晶体绝缘相与二阶拓扑相的转变	毛 宁	山东大学
20:10-20:20	S005	晶体对称性破缺导致的谷极化	王媛媛	山东大学
20:20-20:30	S006	Triferroic Chromium Dihalide Monolayer: Implemented by Combining Jahn-Teller Distortion and Interfacial Effect	杨 柳	华中科技大学
20:30-20:40	S007	Excitonic instability and electronic property of two-dimensional materials	董 珊	北京理工大学
20:40-20:50	S008	Electric field control of molecular magnetic state by two-dimensional ferroelectric heterostructure engineering	党 文	江苏师范大学
20:50-21:00	S009	Ideal topological semimetal in bulk boron allotropes	韩圣茹	内蒙古大学

分会场二，主持人：姚裕贵，地点：女神大酒店阳光厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
08:00-08:30	K013	周期体系电子结构计算的量子算法	李震宇	中国科学技术大学
08:30-08:50	I021	Cr 基二维材料的层间磁性与层状超分子晶体中的电荷序	季 威	人民大学
08:50-09:10	I022	二维材料中新奇能谷物理的理论探索	马衍东	山东大学
09:10-09:30	I023	材料计算中电子轨道的实空间分析	付召明	云南师范大学
09:30-09:50	I024	光照下的角动量流	周 健	西安交通大学
09:50-10:05	O004	复杂应变下金刚石的力学行为与电子传导特性	刘 畅	吉林大学
10:05-10:20	茶歇			

分会场二，主持人：陈克求，地点：女神大酒店阳光厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
10:20-10:40	I025	亚 10 nm 晶体管研究进展	吕 劲	北京大学
10:40-11:00	I026	基于分子的低维磁性材料的理论设计	武晓君	中国科学技术大学
11:00-11:20	I027	纯无机钙钛矿材料中缺陷容忍性的第一性原理计算研究	孙宜阳	中国科学院上海硅酸盐研究所
11:20-11:40	I028	金属-多层二维半导体异质结中的费米能级退钉扎	石兴强	河北大学
11:40-12:00	I029	碘化物二维磁性材料及其输运性质	袁宏宽	西南大学
12:00-13:00	午餐			

分会场二，主持人：戴瑛，地点：女神大酒店阳光厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
14:00-14:20	I030	纳米尺度材料与器件热、电输运与热电转换机理研究	陈克求	湖南大学
14:20-14:40	I031	二维电子材料与器件的理论研究	张胜利	南京理工大学
14:40-15:00	I032	Topological quantum states in two-dimensional magnets	牛成旺	山东大学
15:00-15:20	I033	复杂应变下强共价材料的结构和物性调控	李全	吉林大学
15:20-15:40	I034	类黑磷二维热电材料的结构设计：尺寸优化与界面调控	李煜	深圳大学
15:40-16:00	I035	二维金属基化合物的结构与性能研究	周晓成	南京师范大学
16:05-16:20	茶歇			

分会场二，主持人：谢禹，地点：女神大酒店阳光厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
16:20-16:40	I036	基于无轨道密度泛函理论的 ATLAS 计算方法与软件	王彦超	吉林大学
16:40-17:00	I037	单层和少层磷烯边界重构对制备和电子性质的影响	高峻峰	大连理工大学
17:00-17:20	I038	二维结构预测发现特定拓扑、功能材料及机制	张珉	东北师范大学
17:20-17:40	I039	Charge doping induced two-step reversible structural phase transitions and electromechanical actuation in two-dimensional 1T'-MoS ₂	邓俊楷	西安交通大学
17:40-18:00	I040	Engineering the anion ordering and ferroelectricity in heteroanionic perovskite for photocatalytic and photovoltaic applications	侯高阳	西安交通大学
18:00-18:15	O005	GaS/g-C ₃ N ₄ 异质结光电特性的第一性原理研究	崔真	西安理工大学
18:15-18:30	O006	非金属催化剂用于高效一氧化氮还原产氨	吴倩	山东大学
18:30	晚餐			

(学生报告专场) 分会场二, 主持人: 李能、马衍东, 地点: 女神大酒店阳光厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
19:30-19:40	S010	Cu ₂ N 和 CuN ₂ 单层作为 CO ₂ RR 的高效电催化剂	贾晶晶	哈尔滨师范大学
19:40-19:50	S011	二维 Ti ₂ C 吸附肺癌气体标志物乙苯的第一性原理研究	赵丹	山东大学
19:50-20:00	S012	2H-MoTe ₂ 和 1T'-WTe ₂ 面内异质结的第一性原理研究	张潘	河北师范大学
20:00-20:10	S013	二维 g-CN 负载的单原子催化剂用于电催化氮还原的研究	王淑华	山东大学
20:10-20:20	S014	配位调节单原子铁催化剂上氮还原反应的活性和选择性的理论研究	焦东旭	哈尔滨师范大学
20:20-20:30	S015	C ₃ N ₅ 多层: 一种可全解水的无金属高效催化剂	齐思云	山东大学
20:30-20:40	S016	铂在二氧化铈晶界表面上偏聚性质的理论研究	李哲	河北师范大学
20:40-20:50	S017	H ₄ ,4,4-graphyne 用于双功能单原子催化剂的理论研究	张好娜	山东大学
20:50-21:00	S018	过渡金属吸附调节 Cr 基 MXenes 氧电子轨道占据以提高 HER 活性	陈璐	河南师范大学

分会场三, 主持人: 陆瑞锋, 地点: 女神大酒店如意厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
08:00-08:30	K014	Theoretical Design of Two-Dimensional Dirac Materials: Models, Materials and Applications	赵明文	山东大学
08:30-08:50	I041	半经典广义朗之万分子动力学	吕京涛	华中科技大学
08:50-09:10	I042	计算理解内嵌金属富勒烯	金朋	河北工业大学
09:10-09:30	I043	硫基金纳米团簇的结构机制的理论探索	许文武	宁波大学
09:30-09:50	I044	酸性电解水催化剂的理论设计与模拟	田子奇	中国科学院宁波材料技术与工程研究所
09:50-10:05	O007	二维反-范特霍夫/勒贝尔阵列 AlB ₆ -ptAl-array 纳米片, 具有很高的稳定	宋冰宜	华中科技大学

		性、非常独特的几何结构、新奇的三重狄拉克锥和狄拉克节点环、以及超导电性		
10:05-10:20	茶歇			

分会场三，主持人：杜世萱，地点：女神大酒店如意厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
10:20-10:40	I045	基于第一性原理计算的钙钛矿氧化物 OER 的机器学习研究	刘 轶	上海大学
10:40-11:00	I046	气相金属氢化物团簇活化转化 CO ₂	李晓娜	中国科学院化学研究所
11:00-11:20	I047	低维碳材料电化学催化剂的理论设计	王 颖	中国科学院长春应用化学研究所
11:20-11:40	I048	铜系离子水团簇的饱和配位数研究	胡憾石	清华大学
11:40-12:00	I049	锆合金腐蚀的第一性原理研究：从初始氧化到氧化膜性质	谢耀平	上海大学
12:00-13:00	午餐			

分会场三，主持人：刘英，地点：女神大酒店如意厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
14:00-14:20	I050	钙钛矿光生电荷动力学	龙 闰	北京师范大学
14:20-14:40	I051	Unconventional untrahigh piezoelectricity in two-dimensional mixed-valence ferroelectrics and hydrogen-bonded ferroelectrics	吴梦昊	华中科技大学
14:40-15:00	I052	二维拓扑量子材料的理论设计及其外场调控	王 锐	重庆大学
15:00-15:20	I053	二维“半”负泊松比材料的第一性原理预测	马风仙	河北师范大学
15:20-15:40	I054	Tunable bending modulus of graphene oxide	刘立钊	大连理工大学
15:40-16:00	I055	插层构筑设计二维材料家族 MA ₂ Z ₄ ：具有拓扑、磁性和超导等特性	王 磊	中国科学技术大学

16:00-16:20	茶歇
-------------	----

分会场三，主持人：周思，地点：女神大酒店如意厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
16:20-16:40	I056	理论化学计算研究催化氧化处理挥发性有机污染物微观过程	敖志敏	广东工业大学
16:40-17:00	I057	恒电势条件下电催化反应活性的理论预测与动力学模拟	段志遥	西北工业大学
17:00-17:20	I058	金属纳米粒子生长动力学理论	胡素磊	中国科学技术大学
17:20-17:40	I059	仿生[NiFe]氢化酶催化质子还原反应机制的理论研究	汤浩	温州大学
17:40-18:00	I060	Metal synergistic effects on CO ₂ reduction over bimetallic electrocatalysts	赵忠龙	内蒙古大学
18:00-18:15	O008	钙钛矿型复合光催化材料的界面结构与反应微观机制	周新	大连大学
18:15-18:30	O009	金属支撑石墨烯的表界面调控及其催化机理研究	王强	南京工业大学
18:30	晚餐			

(学生报告专场) 分会场三，主持人：陈翔、吕健，地点：女神大酒店如意厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
19:30-19:40	S019	缺电子体系对 Na 原子吸附强弱的机理研究-以 MoS ₂ 为例	庞玉东	河南师范大学
19:40-19:50	S020	预测的 MnB ₆ 单层具有室温铁磁性和高磁各向异性	高珍	河北师范大学
19:50-20:00	S021	过渡金属二聚体锚固 C ₂ N 作为双原子催化剂在锂硫电池中的应用	朱一凡	中国石油大学(华东)
20:00-20:10	S022	DFT 计算 Z-型异质结 g-CN/MXene 光催化降解 VOCs 的机理研究	周君慧	广东工业大学
20:10-20:20	S023	Janus 三族硫属化合物单层的非线性光学效应	李仕琪	大连理工大学
20:20-20:30	S024	Understanding the organic photovoltaic properties of the fused ring electron acceptor with decacyclic core	杨兵	兰州理工大学

20:30-20:40	S025	Undamped plasmon modes and enhanced superconductivity in metal diborides	高 涵	山东大学
20:40-20:50	S026	Dirac Semimetals in Homogeneous Holey Carbon Nitride Monolayers	谭 锐	湘潭大学
20:50-21:00	S027	边缘管状重构磷烯纳米带的空间电荷分离与线性可调带隙	夏明月	大连理工大学

7 月 23 日，星期五
(**Fri., Jul. 23**)

7月23日，星期五 (Fri., Jul. 23)

分会场一，主持人：李震宇，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
08:00-08:30	K015	Pseudo-Hermitian magnon polariton system	夏 钊	北京计算科学研究中心
08:30-08:50	I061	石墨烯中不同原子配位环境对单个金属活性的调控研究	唐亚楠	郑州师范学院
08:50-09:10	I062	The story of contact angles	李 晖	北京化工大学
09:10-09:30	I063	Natural layered materials as ideal optical hyperbolic media	杨声远	新加坡科技设计大学
09:30-09:50	I064	动力学模拟在催化反应机理研究中的应用与发展	李 磊	南方科技大学
09:50-10:05	O010	硼石墨烯的剥离和氧化研究	穆跃文	山西大学
10:05-10:20	茶歇			

分会场一，主持人：李亚飞，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
10:20-10:40	I065	Design and catalytic performance of heptazine-based carbon nitrides	颜力楷	东北师范大学
10:40-11:00	I066	二维拓扑聚合物的能带结构工程及其在光解水中的应用	荆 宇	南京林业大学
11:00-11:20	I067	掺杂碳基催化剂催化氧还原活性与稳定性机理研究	李 莉	重庆大学
11:20-11:40	I068	CN-based single-atom-catalysts towards N ₂ reduction reaction	甘立勇	重庆大学
11:40-12:00	I069	若干体系的理论计算与实验工作：光电催化反应的量子视角	李中华	哈尔滨工业大学
12:00-13:00	午餐			

大会会场，主持人：王舒东，地点：女神大酒店千人厅

13:00-13:50	PL03	物理学是灯：照亮了新材料设计的路	孙 强	北京大学
-------------	------	------------------	-----	------

分会场一，主持人：刘晓静，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
14:00-14:20	I070	基于结构描述符的多相催化剂设计	程道建	北京化工大学
14:20-14:40	I071	The hydrogen evolution reaction of D-MXenes: ab initio calculations	李 能	武汉理工大学
14:40-15:00	I072	Single-atom electrocatalysts for energy and environmental materials	路战胜	河南师范大学
15:00-15:20	I073	单原子催化剂中的自旋磁矩描述符	钟文辉	曲阜师范大学
15:20-15:40	I074	多尺度摩擦化学-连结第一性原理计算到实验	杨 静	中山大学
15:40-16:00	I075	High throughput screening for fast Li-ion conductors	肖 波	烟台大学
16:00-16:20	茶歇			

分会场一，主持人：陈巍，地点：女神大酒店千人厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
16:20-16:40	I076	电池与电催化过程中的界面能问题	张会刚	中国科学院过程工程研究所
16:40-17:00	I077	Lithium bonds in lithium batteries	陈 翔	清华大学
17:00-17:15	O011	Carbon fragments as highly active metal-free catalysts for the oxygen reduction reaction: a mechanistic study	毛可可	安徽工业大学
17:15-17:30	O012	非对称二维材料的二阶非线性光学响应	魏亚东	哈尔滨工业大学
17:30-17:45	O013	锂硫电池的催化反应动力学调控研究	沈子涵	中国科学院过程工程研究所
17:45-18:00	O014	基于团簇组装设计磷基纳米材料	王淑凯	内蒙古大学

大会会场，主持人：李锋钰，地点：女神大酒店千人厅

18:00-18:30	闭幕（颁发优秀学生报告、海报奖）
18:30	晚餐

分会场二，主持人：龚学庆，地点：女神大酒店阳光厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
08:00-08:30	K016	Determining and improving the kinetic stability of energy-rich molecules	丁益宏	温州大学
08:30-08:50	I078	尿素电化学合成催化剂的设计与模拟	李亚飞	南京师范大学
08:50-09:10	I079	轨道调控表界面催化	刘晓静	山东大学
09:10-09:30	I080	一氧化碳/氮还原光电催化剂设计	尹利长	中国科学院金属研究所 单位
09:30-09:50	I081	非金属碳基材料促进 SO ₂ 的 O ₂ 分子非解离氧化	岑望来	四川大学
09:50-10:05	O015	Doped carbon materials for oxygen electro-catalysis	张喜林	河南师范大学
10:05-10:20	茶歇			

分会场二，主持人：孙立忠，地点：女神大酒店阳光厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
10:20-10:40	I082	二维 MX ₂ 晶界的“表情包”	张助华	南京航空航天大学 纳米科学研究所
10:40-11:00	I083	The rising of intrinsic magnetic topological insulators MnBi ₂ Te ₄ /(Bi ₂ Te ₃) _n	刘奇航	南方科技大学
11:00-11:20	I084	半导体磁双层膜中的谷劈裂	唐黎明	湖南大学
11:20-11:40	I085	几种热电材料的第一性原理计算和中子散射研究	王保田	中国科学院高能物理研究所

11:40-12:00	I086	二维材料狄拉克锥形成的六次对称性根源	秦绪明	安阳师范学院
12:00-13:00	午餐			

分会场二，主持人：钱钊，地点：女神大酒店阳光厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
14:00-14:20	I087	MXenes 基材料的电子性质、催化和磁性性能调控的理论研究	杨宗献	河南师范大学
14:20-14:40	I088	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
14:40-15:00	I089	用于选择性制备丙烯的催化剂的设计与机理研究	林海平	陕西师范大学
15:00-15:20	I090	金属-硼二维纳米材料的结构预测和电磁性质调控的理论研究	张秀云	扬州大学
15:20-15:40	I091	微纳米反应器设计	刘健	大连化学物理研究所
15:40-16:00	I092	Tuning the interfacial polarization fields of single-atom catalysts by combining hexagonal boron nitride and graphene support	唐绍彬	赣南师范大学
16:00-16:20	茶歇			

分会场二，主持人：戴振宏，地点：女神大酒店阳光厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
16:20-16:40	I093	二维储能材料生长机制的理论研究	谢禹	吉林大学
16:40-17:00	I094	二维材料纳米结构的生长/刻蚀机理与可控制备	马亮	东南大学
17:00-17:20	I095	二维材料的生长机制探究	韩楠楠	西北工业大学
17:20-17:40	I096	核壳纳米材料的理论设计	张亮	清华大学
17:40-17:55	O016	Anti-MXenes from non-van der Waals bulks for electrochemical applications: the merit of metallicity and active basal plane	顾金星	波多黎各大学

18:00-18:30	闭幕及颁发优秀海报、学生报告奖（千人厅）
18:30	晚餐

分会场三，主持人：陈宏善，地点：女神大酒店如意厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
08:00-08:30	K017	含硼多面体核-壳团簇：可能的储氢材料	刘英	河北师范大学
08:30-08:50	I097	水界面物理化学过程的多尺度模拟	朱重钦	北京师范大学
08:50-09:10	I098	Intermolecular hydrogen-bonding of confined water	王志刚	吉林大学
09:10-09:30	I099	多孔冰相预测及其储氢性能研究	刘源	中山大学
09:30-09:50	I100	碳氮二维材料的结构与性质调控	袁清红	华东师范大学
09:50-10:05	O017	固体材料中的拓扑声子态	郑宝兵	宝鸡文理学院
10:05-10:20	茶歇			

分会场三，主持人：赵景祥，地点：女神大酒店如意厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
10:20-10:40	I101	二维非晶单层安德森局域态和表面范霍夫奇点的高效催化特性	贾瑜	河南大学
10:40-11:00	I102	经济、高效、稳定单原子尺度催化剂设计的理论计算研究	李顺方	郑州大学
11:00-11:20	I103	Non-negligible effects of electrochemical environment factors in density functional theory calculation	李佳	清华大学
11:20-11:40	I104	Theoretical investigation on the electronic properties of monochalcogenide based on main group metal	黄玉成	安徽师范大学
11:40-12:00	I105	氮化碳等光催化体系的计算模拟	林伟	福州大学

12:00-13:00	午餐
-------------	----

分会场三，主持人：刘寒雨，地点：女神大酒店如意厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
14:00-14:20	I106	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
14:20-14:40	I107	Tunable magnetic anisotropy and topological spin textures in a janus $MnBi_2(Se, Te)_4$ Monolayer	米文博	天津大学
14:40-15:00	I108	有机磷光材料的多尺度模拟	马会利	南京工业大学
15:00-15:20	I109	Classic molecular dynamics simulations of the 3rd-generation carbon-metal potential on the growth of the carbon nanomaterials	徐紫巍	江苏大学
15:20-15:40	I110	理论模拟在水泥熟料合成中的应用	赵瑞奇	河南理工大学
15:40-16:00	I111	新型二维材料材料在能源领域的应用与凝聚态化学	贾然	吉林大学
16:00-16:20	茶歇			

分会场三，主持人：程道建，地点：女神大酒店如意厅

时间 Time	编号 No.	报告标题 Title	报告人 Speaker	单位 Affiliation
16:20-16:40	I112	高压超导氢化物的结构设计	刘寒雨	吉林大学
16:40-17:00	I113	Fe_3O_4 体相、表面及纳米粒子亚铁磁体系的第一性原理研究	柳洪盛	大连理工大学
17:00-17:20	I114	高熵合金的第一性原理计算研究	张华磊	西安交通大学
17:20-17:40	I115	新能源产品的精确评估	杨笛	中央民族大学
17:40-17:55	O018	尖晶石 $LiMn_2O_4$ 中本征点缺陷性质的第一性原理计算研究	王建川	中南大学
18:00-18:30	闭幕及颁发优秀海报和学生报告奖（千人厅）			
18:30	晚餐			

墙报 (Posters)

墙报交流在 7 月 21 日会议茶歇时段进行, 请各位代表按照自己的编号张贴好自己的墙报, 墙报尺寸为 1.2 m (高) × 0.9 m (宽), 如需工具请向会务工作人员索取。颁奖仪式将于 7 月 23 日闭幕式时段进行。

编号 No.	第一作者 First author	单位 Affiliation	标题 Title
P001	马霞霞	清华大学	The Defect Chemistry of Carbon Frameworks for Regulating the Lithium Nucleation and Growth Behaviors in Lithium Metal Anodes
P002	董慧龙	常熟理工学院	Theoretical investigations on two-dimensional carbon-based materials as cathode catalysts in lithium oxygen batteries
P003	巩兵兵	中国科学技术大学	Theoretical design of nitrogen-doped graphene supported Platinum single-atom for full ammonia borane hydrolysis
P004	徐熙龙	山东大学	二维晶格中稳定的谷-层耦合及设计理念
P005	刘泽	河北工业大学	Quantum Anomalous Hall Effect of Dirac Half-metal Monolayer TiCl_3 with High Chern Number
P006	魏东	河南师范大学	Strain and electric field tuned electronic and photoelectric properties of SeWS/h-BP van der Waals heterostructures
P007	唐博	中国科学技术大学	Molecular Mechanisms and Atmospheric Implications of Criegee Intermediate-Alcohol Chemistry in the Gas Phase and Aqueous Surface Environments
P008	马鑫波	中国科学技术大学	Efficient Direct Band Gap Photovoltaic Material Predicted Via Doping Double Perovskites $\text{Cs}_2\text{AgBiX}_6$ ($X = \text{Cl}, \text{Br}$)
P009	罗霄	中国科学技术大学	Sulfur stabilizing metal nanoclusters on carbons at high temperatures
P010	毛秀娟	河北工业大学	Pb- WSe_2 吸附体系中非常规的 Rashba 型和 Zeeman 型自旋劈裂
P011	鞠林	安阳师范学院	铁电-顺电转换对二维铁电材料光解水性能的调控
P012	杨翠翠	重庆大学	X 型石墨烯纳米带的二阶非线性光学性质的理论研究
P013	姚楠	清华大学	液态电解液介电常数变化的化学本质与微观机制
P014	郭高甫	河南师范大学	Gas Detection for NO_2 and SO_2 Based on Tape-Heme Monolayer
P015	罗瑶	安徽师范大学	硅基 MSi_2N_4 ($M = \text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}, \text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}, \text{Cr}, \text{Mo}$ 和 W) 单层膜中有效 NRR 电催化剂的筛选
P016	孙倩	河南师范大学	Cr_2C MXene 材料电子性质和磁性的第一性原理研究
P017	李天春	南京林业大学	二维 $\text{M}_3(\text{C}_6\text{S}_3\text{O}_3)_2$ 作为导电氧还原反应(ORR)催化剂

P018	余 恒	河南师范大学	Effects of inherent defects on the properties of 2D BAs
P019	骆晴晴	河南师范大学	Two-dimensional GaN/WSe ₂ van der Waals Heterostructures for electronic properties and photocatalytic
P020	朱常岩	东北师范大学	二维过渡金属硼化物作为电催化剂的理论研究
P021	张志华	山东大学	Bi-Atom Active Sites Embedded in A Two-Dimensional Covalent Organic Framework for Efficient Nitrogen Reduction Reaction
P022	韩文华	宁波大学	Ring Model: Structural Insights into the Interfacial Interactions between SR[Au(SR)] _x (x = 0,1,2,3,...)Protection Motifs and Gold Cores in Thiolate-Protected Gold Nanoclusters
P023	刘鹏叶	宁波大学	Two-Dimensional Growth Mode of Thiolate-Protected Gold Nanoclusters
P024	吴葆春	北京大学	High-performance Spin Filters and Spin Field Effect Transistors Based on Bilayer VSe ₂
P025	任曼曼	北京化工大学	Transition Metal Atoms (Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Doped RuIr Surface for the Hydrogen Evolution Reaction: A First-Principles Study
P026	王冰雪	山东大学	调控负载在石墨氮化碳上双原子铁催化剂用于电化学氮还原的催化性能
P027	刘士琦	北京大学	Can ultra-thin Si FinFETs work well at the sub-10 nm gate-length region?
P028	朱欣悦	南京林业大学	天然醌类分子作为固态金属电池电极材料的理论研究
P029	赵 熹	北京师范大学	氢氘同位素效应对 CH ₃ NH ₃ PbI ₃ 钙钛矿电子空穴复合的影响
P030	代丹丹	北京师范大学	二维 Ruddlesden-Popper 钙钛矿中光激发载流子动力学研究
P031	刘昊松	中国石油大学（华东）	二维 GeAs 与金属接触的界面性质的研究
P032	王中腾	浙江农林大学	“On-off-on” Fluorescence Switch of Graphene Quantum Dots: A Cationic Control Strategy
P033	杨 点	西北工业大学	金属掺杂黑磷烯在气体传感和氢催化方面的应用：第一性原理预测
P034	杨佳妹	大连理工大学	Accurate Electronic Properties and Nonlinear Optical Response of Two-dimensional MA ₂ Z ₄
P035	任洋洋	华中科技大学	Ultra-high piezoelectric coefficients and strain-sensitive Curie temperature in hydrogen-bonded ferroelectrics
P036	魏文娅	华东师范大学	Bandgap engineering of two-dimensional C ₃ N bilayers
P037	高亚鑫	华中科技大学	A Family of Ionic Supersalts with Covalent-like Directionality and Unconventional Multiferroicity

P038	邢健沛	大连理工大学	Rational design of 2D organic magnets with giant magnetic anisotropy based on two-coordinate 5d transition metals
P039	张艳雪	大连理工大学	单层 α 相正交褶皱结构普适的管状边界
P040	刘芹茜	大连理工大学	Layer-dependent magnetic phase diagram in Fe_nGeTe_2 ($3 \leq n \leq 7$) ultrathin films: coexistence of localized and itinerant electronic states of Fe with variable valence
P041	王立锋	中国科学技术大学	g- C_3N_4 Derivative Artificial Organic/Inorganic Composite Solid Electrolyte Interphase Layer for Stable Lithium Metal Anode
P042	孙英杰	河北科技大学	Two-dimensional Multiferroic FeCl with Room Temperature Ferromagnetism and Tunable Magnetic Anisotropy via Ferroelectricity
P043	刘思彤	浙江农林大学	N-heterocyclic carbene in low-dimensional carbon allotropes: from carbon nitride to NRR catalyst
P044	王海云	中国科学技术大学	IrW nanochannel support enabling ultrastable electrocatalytic oxygen evolution at 2 A cm^{-2} in acidic media
P045	李秀玲	南京师范大学	Expanded Porphyrin Nanosheet for Metal-free Photocatalytic Water Splitting Using Visible Light
P046	戴玉鑫	安徽师范大学	第 IV 族类蓝磷相单硫化物本征压电性的理论研究
P047	程 成	北京师范大学	Cu/TiO_2 单原子水分解催化剂的活性起源
P048	史 然	北京师范大学	钙钛矿铁弹畴壁光生载流子动力学的理论计算
P049	李泽厚	湘潭大学	Topological quadrupole phase in two dimensional C_2N
P050	胡 绪	南开大学	The effect of axial O atom on the catalytic mechanism of NiN_4 single-atom catalysts in CO_2RR : An ab initio molecular dynamics study
P051	党 茜	赣南师范大学	层状插入金属基材料固氮催化剂的理论设计及机理研究
P052	刘天涌	赣南师范大学	硼碳氮纳米管支撑的单原子催化剂：氮化硼和碳区域的协同效应
P053	郭 凯	浙江农林大学	Crown ethers in hydrogenated graphene
P054	袁汝明	厦门大学	锂离子电池正极材料以及分子添加剂的 DFT 理论研究
P055	陈乐添	南开大学	机器学习局域力场与吸附势辅助筛选析氢反应合金催化剂
P056	夏 海	南开大学	Electronic and photocatalytic performance of boron phosphide-blue phosphorene vdW heterostructures
P057	高寅露	大连理工大学	Magnetic field modulated photoelectric devices in ferromagnetic semiconductor CrXh ($\text{X} = \text{S/Se}$, $\text{h} = \text{Cl/Br/I}$) van der Waals heterojunctions

P058	黄芬芬	湘潭大学	实际材料 C ₃ N 中的高阶拓扑声子研究
P059	张含宇	中国科学院化学研究所	水在钷团簇上析氢反应机理
P060	孙晓甜	洛阳师范学院	Performance limit of Monolayer MoSi ₂ N ₄ Transistors
P061	王文静	南京大学	The Effect of Doping Engineering on the Electronic Structure of Metastable β -Fe ₂ O ₃ : A GGA+U Viewpoint
P062	王志勇	桂林理工大学	The effects of vacancy and heteroatoms-doping on the stability, electronic and magnetic properties of blue phosphorene
P063	王燕遐	大连理工大学	Ferromagnetic Dirac Half-Metallicity in Transition Metal Embedded Honeycomb Borophene
P064	赵莹	大连理工大学	A two-dimensional ferromagnetic metallic material containing planar hexacoordinate Fe atom
P065	朱严	大连理工大学	The Effect of Vacancy on Magnetic properties in Monolayer VSe ₂
P066	雷鑫	中科院化学研究所	Nb ₁₁ O ₁₅ -超原子团簇的气相合成
P067	魏萌	南京大学	半导体性质/铁电性质的二维有机-无机杂化钙钛矿的分子设计
P068	卢鑫	湘潭大学	Pykp: A toolkit to construct the k·p model at a high symmetry point
P069	翟麟鑫	清华大学	石墨烯/金属界面 Wiedemann-Franz 定律与量子输运
P070	梁家毓	华东师范大学	Mechanism of Nitrogen Doping Concentration Promotion on Nitrogen-Doped Carbon Materials
P071	孟宋杰	河南师范大学	Non-metal atoms doped on BSe monolayer as a promising electrocatalysts for hydrogen evolution reaction (HER)
P072	鲁征宇	南开大学	First-principles exploring isovalent substitution in Li ₃ In _{1-x} Sc _x Cl ₆ as fast ionic conductor
P073	崔超男	中国科学院化学研究所	三原子金属团簇催化氮气活化与转化的研究
P074	赵艳艳	大连理工大学	调控卤氧化铋界面光生载流子分离与复合用于固氮
P075	杨小伟	大连理工大学	MBenes: 用于氮还原反应(NRR)的新型电化学催化剂
P076	朱云来	华中科技大学	基于过渡金属掺杂蓝磷/MoSe ₂ 的范德华异质结的第一性原理探究
P077	李东治	华东理工大学	遗传算法在 ZnO 表面 H ₂ O 吸附构型研究中的应用
P078	周慧	华东理工大学	不同状态下 CeO ₂ (100)表面催化 CO 氧化反应的理论模拟研究
P079	乔鑫	内蒙古大学	2D V-VI Binary Nanosheets with Square Lattice: A Theoretical Investigation

P080	刘 宇	内蒙古大学	A Library of Two-Dimensional Square Disulfide Monolayers via Computational Explorations
P081	余林珂	内蒙古大学	Revisiting the Catalytic Activity of double-atom catalysts for Oxygen Reduction Reaction from the First Principles Considering Magnetic Coupling
P082	Shamraiz Hussain Talib	河南师范大学	Polyoxometalate Cluster Based Single-Atom Catalyst with High Performance for Water Splitting and Oxygen Reduction Reaction
P083	富忠恒	清华大学	硫化物电解质中的力学-化学耦合
P084	潘保儒	湘潭大学	Slater-Koster parametrization for the phonons of monolayer MoX ₂
P085	高振任	湘潭大学	Effects of the Introduced in-Gap Bands on Photoluminescence of Cs ₂ XCl ₆ (X=Sn, Ti, Zr, Hf) Perovskites: A First-Principles Study
P086	杨 晨	北京大学	Applications of the first-principles calculations in researching ion-battery anode&cathode materials
P087	任泽斌	山东大学	二维 MOFs 中配体和应力调控析氢性能
P088	刘虹伶	山东大学	二维 CuInP ₂ S ₆ 用于光催化水分解的探究
P089	王鑫鑫	山东大学	Janus ZrSSe 和 HfSSe 的纵向和横向异质结构的电子性质
P090	王 娟	山东大学	Stable Multifunctional Single-atomic Catalysts Resulted from the Synergistic Effect of Anchored Transition-metal Atoms and Host Covalent-organic Frameworks
P091	杨 哲	山东师范大学	Electronic structure and enhanced photocatalytic properties in Ca(OH) ₂ /GeC van der Waals heterostructure
P092	陈映杉	湘潭大学	Ideal topological phononic nodal chain in K ₂ O materials class
P093	李文琪	湘潭大学	A novel carbon-nitrogen Dirac semimetal C ₅ N ₄ monolayer
P094	何沈达	湘潭大学	Fully spin-polarized nodal chain state in V ₂ Zn ₄ O ₈ spinel half metals
P095	杨新伟	河南师范大学	TM 单层修饰的 MXene 的稳定性和 ORR/OER 双功能催化研究
P096	王 晶	河南师范大学	First principles study, geometry and electronic structure of two-dimensional Nb ₂ CT _x mxenes
P097	景冰花	广东工业大学	理论计算评价光催化剂 VOCs 降解性能: g-C ₃ N ₄ dots/graphene 为例
P098	李倩菀	广东工业大学	第一性原理计算研究双原子催化剂 TM/UiO-66 催化氧化 CO 机理
P099	李雅楠	中国石油大学 (华东)	氮掺杂石墨炔-MXene 复合结构: 高效的双功能电催化剂
P100	丛 瑶	中国石油大学 (华东)	单层 SiAs 与金属界面性质的第一性原理研究

P101	王佳宁	河北师范大学	预测 MoSi ₂ N ₄ 单层在光催化方面的应用前景
P102	庞荣天	内蒙古大学	Interlayer exciton properties of MoSSe/WSSe heterostructure
P103	王 宇	兰州理工大学	The electronic structures and related properties of PBDB-T:IT-2X (X= H, F, Cl, Br) organic photovoltaic heterojunctions
P104	王梦霞	西安邮电大学	CdS/WS ₂ 异质结带阶和电子结构的第一性原理研究
P105	段训凯	江苏师范大学	二维多铁范德华异质结构的设计与性能调控
P106	王 静	内蒙古大学	Exciton states in Chiral Graphene Nanoribbons
P107	张奕林	复旦大学	Fully Boron-Sheet-Based Field Effect Transistors from First- Principles: Inverse Design of Semiconducting Boron Sheets
P108	乌云达来	内蒙古大学	First-Principles Study on The Electron-Phonon Interaction and Transport Properties in Two-Dimensional BeP ₂ C
P109	毛 宇	内蒙古大学	The structural, mechanical and optical properties of ternary mixed crystals In _x Ga _{1-x} As with zinc-blende structure by first-principle calculations
P110	毛小青	内蒙古大学	The electron-phonon interaction of Cs-based inorganic halide perovskites (CsSnBr ₃ , CsSnCl ₃)
P111	刘春艳	内蒙古大学	The electron-phonon interaction of LiAlTe ₂
P112	李 洁	内蒙古大学	Machine learning force field simulations of carbon systems based on first-principle calculations
P113	韩 婷	内蒙古大学	Machine learning force field simulations of sulfur systems based on first-principle calculations
P114	秦增明	哈尔滨师范大学	过渡金属原子负载在 MoSe ₂ 纳米片作为高效催化剂的理论研究
P115	宋 顺	内蒙古大学	Effect of Graphene and MoS ₂ In-Plane Heterojunction Interface on Transport Properties
P116	邹争春	湘潭大学	Intrinsic spin Hall conductivity platform in triply degenerate semimetal
P117	张原硕	太原科技大学	SOFC 连接体合金表面初步氧化的分子动力学模拟
P118	郭甲田	山东师范大学	Valley polarization properties in two-dimensional H-Tl ₂ O/CrI ₃ heterostructure
P119	武佳妮	内蒙古大学	A comparative study of machine learning of force fields between neural network and linear regression models
P120	周欣蕊	中央民族大学	WO ₃ -TiO ₂ 混合材料薄膜的光伏储能效应

P121	唐 孟	东北师范大学	二维碳硫材料作为钾离子电池的阳极材料
P122	王 波	东北师范大学	宽带隙 P-S 单层: 具有各向异性和超高载流子迁移率
P123	韩圣茹	内蒙古大学	Strain Induced Ideal Topological Semimetal in $Ort-B_{32}$ with Parallel Arc-Like Nodal Lines and Anisotropic Multiple Weyl Fermions
P124	潘慧	湖南大学	Non-equilibrium Green's function formalism for magnon-phonon scattering in three-dimensional nanostructure
P125	丁中科	湖南大学	通过量子干涉效应调控纳米体系输运行为
P126	孟海红	内蒙古大学	Methane Conversion on Metal Dimer Embedded Phthalocyanine Sheet: A Theoretical Study

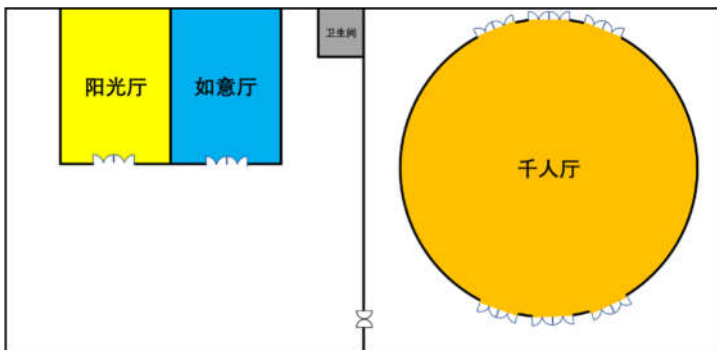
会议记录

会议记录

会议记录

会议日程一览表

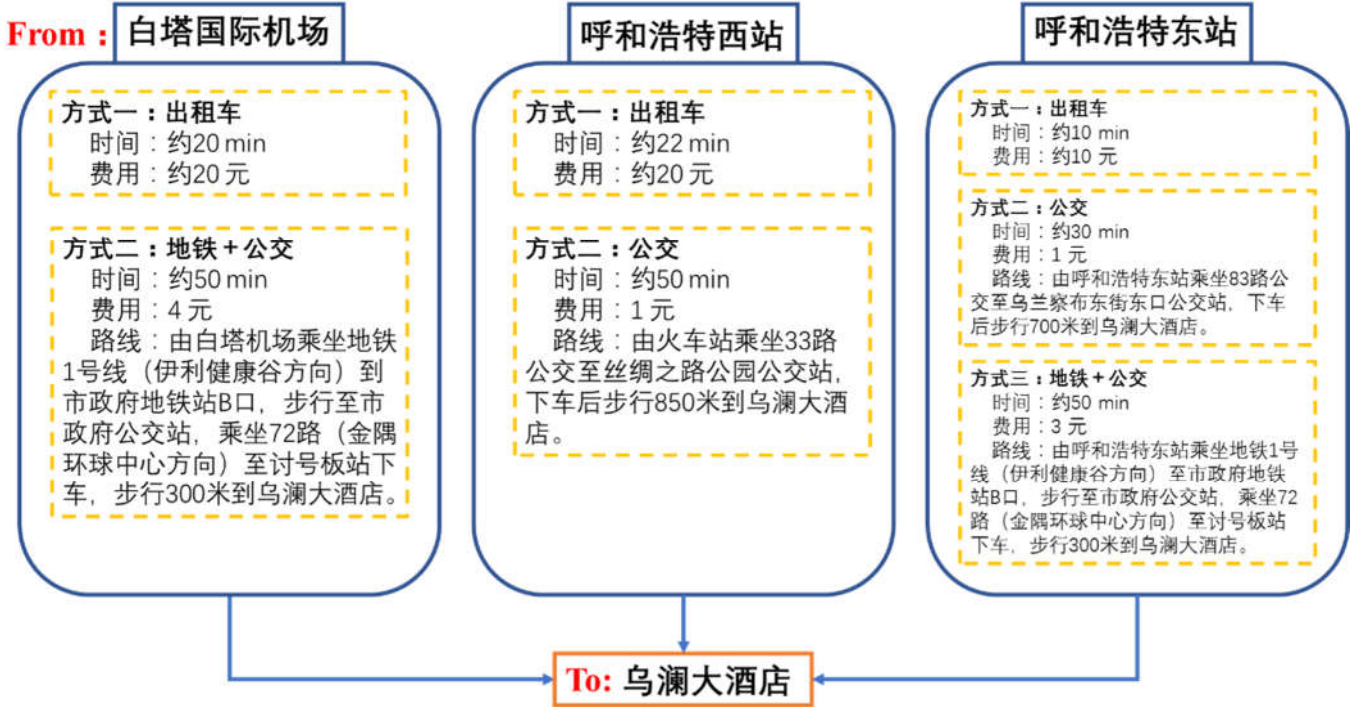
2021.07.21		2021.07.22				2021.07.23			
千人厅		千人厅	阳光厅	如意厅	千人厅	阳光厅	如意厅		
主持人	宫箭	主持人	李隽	姚裕贵	陆瑞锋	主持人	李震宇	龚学庆	陈宏善
8:00-8:40	开幕式 王广厚院士致辞 校长致辞 合影	8:00-8:30	蒋青	李震宇	赵明文	8:00-8:30	夏轲	丁益宏	刘英
		8:30-8:50	骆智训	季威	吕京涛	8:30-8:50	唐亚楠	李亚飞	朱重钦
		8:50-9:10	肖建平	马衍东	金朋	8:50-9:10	李晖	刘晓静	王志刚
		9:10-9:30	王璐	付召明	许文武	9:10-9:30	杨声远	尹利长	刘源
主持人	赵纪军	9:30-9:50	杨利明	周健	田子奇	9:30-9:50	李磊	岑望来	袁清红
8:40-9:10	魏苏准	9:50-10:05	田洪镇	刘畅	宋冰宜	9:50-10:05	穆跃文	张喜林	郑宝兵
9:10-09:40	姚裕贵	10:05-10:20	茶歇			10:05-10:20	茶歇		
09:40-10:00	茶歇	主持人	傅钢	陈克求	杜世萱	主持人	李亚飞	孙立忠	赵景祥
主持人	魏苏准	10:20-10:40	江凌	吕劲	刘轶	10:20-10:40	颜力楷	张助华	贾瑜
10:00-10:30	王前	10:40-11:00	陈巍	武晓君	李晓娜	10:40-11:00	荆宇	刘奇航	李顺方
10:30-11:00	杜世萱	11:00-11:20	张妍宁	孙宜阳	王颖	11:00-11:20	李莉	唐黎明	李佳
11:00-11:30	骆军委	11:20-11:40	何朝政	石兴强	胡憾石	11:20-11:40	甘立勇	王保田	黄玉成
11:30-12:00	赵纪军	11:40-12:00	李庚	袁宏宽	谢耀平	11:40-12:00	李中华	秦绪明	林伟
12:00-13:00	午餐	12:00-13:00	午餐			12:00-13:00	午餐		
主持人	李锋钰	主持人	刘志锋			主持人	王舒东		
13:00-13:50	李隽	13:00-13:50	徐昕			13:00-13:50	孙强		
主持人	徐昕	主持人	丁益宏	戴瑛	刘英	主持人	刘晓静	钱钊	刘寒雨
14:00-14:30	马晶	14:00-14:20	朱倍恩	陈克求	龙闰	14:00-14:20	程道建	杨宗献	陆贇豪
14:30-15:00	曹达鹏	14:20-14:40	周思	张胜利	吴梦昊	14:20-14:40	李能	李波	米文博
15:00-15:30	傅钢	14:40-15:00	王维华	牛成旺	王锐	14:40-15:00	路战胜	林海平	马会利
15:30-16:00	龚学庆	15:00-15:20	郭丽敏	李全	马凤仙	15:00-15:20	钟文辉	张秀云	徐紫巍
16:00-16:30	周震	15:20-15:40	吴新平	李煜	刘立钊	15:20-15:40	杨静	刘健	赵瑞奇
16:30-18:00	茶歇、海报评选	15:40-16:00	杨照地	周晓成	王磊	15:40-16:00	肖波	唐绍彬	贾然
		16:00-16:20	茶歇			16:00-16:20	茶歇		
18:00	晚宴	主持人	裴勇	谢禹	周思	主持人	陈巍	戴振宏	程道建
		16:20-16:40	高兴发	王彦超	敖志敏	16:20-16:40	张会刚	谢禹	刘寒雨
主持人	赵国军	16:40-17:00	闫俊丽	高峻峰	段志遥	16:40-17:00	陈翔	马亮	柳洪盛
		17:00-17:20	徐求	张珉	胡素磊	17:00-17:15	毛可可	韩楠楠(I)	张华磊(I)
		17:20-17:40	谭婷	邓俊凯	汤浩	17:15-17:30	魏亚东	张亮(I)	杨笛(I)
		17:40-18:00	赛琳伟	缙高阳	赵忠龙	17:30-17:45	沈子涵	顾金星	王建川
		18:00-18:15	张琪	崔真	周新	17:45-18:00	王淑凯		
		18:15-18:30	姚赛	吴倩	王强	主持人	李锋钰		
		18:30	晚餐			18:00-18:30	闭幕 颁发优秀学生报告、海报奖		
		学生报告专场				18:30	晚餐		
		主持人	龙闰、孙宜阳	李能、马衍东	陈翔、吕健				
		19:30-19:40	乔璐	贾晶晶	庞玉东				
		19:40-19:50	彭瑞	赵丹	高珍				
		19:50-20:00	张婷	张潘	朱一凡				
		20:00-20:10	毛宁	王淑华	周君慧				
		20:10-20:20	王媛媛	焦东旭	李仕琪				
		20:20-20:30	杨柳	齐思云	杨兵				
20:30-20:40	董珊	李哲	高涵						
20:40-20:50	党文	张好娜	谭锐						
20:50-21:00	韩圣茹	陈璐	夏明月						



7月21-23日会议报告地点：
女神大酒店3F会场平面图

交通路线

7月20日会议报到地点：乌澜大酒店一楼大厅



7月21-23日会议报到地点：女神大酒店一楼

酒店间步行路线：

<p>6分钟 450米 女神大酒店（会展店）到乌澜大酒店：出门右转走150米，路口右转再走150米，路口再右转走100米，第二个路口左转走50米。</p>	<p>2分钟 210米 美渡酒店到乌澜大酒店：出门右转走200米。</p>	<p>6分钟 450米 内蒙古世和大酒店到乌澜大酒店：出门右转走120米，到路口右转再行250米。</p>	<p>4分钟 300米 雅斯顿酒店到乌澜大酒店：出门右转走50米，到路口右转再行250米。</p>
---	---	---	---



北京华信鼎成科技有限公司

地址：北京市海淀区上地信息路1号金远见大楼B座816

电话：010-82896982

网址：www.hxps.com.cn