



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

## 摘要集

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



# 目 录

物理学是灯：照亮了新材料设计的路.....	1
XYG3 型双杂化泛函：从分子到材料.....	2
Interplay of Experiment, Theory and Computation in Modern Chemistry.....	3
Band Structure Engineering and Defect Control for Energy and Optoelectronic Applications.....	4
Encyclopedia of emergent particles in three-dimensional crystals.....	5
Recent advances in penta-graphene and pentagon-based 2D materials.....	6
低维量子材料及其异质结的理论设计.....	7
硅基发光理论.....	8
新型二维铁磁材料的设计与调控.....	9
Rational design and fabrications of nanomaterials.....	10
单原子电催化剂的理论设计与合成.....	11
表界面催化氧化的理论研究.....	12
稀土二氧化铈催化材料研究进展.....	13
二维材料在电/光催化实验与计算间架起桥梁.....	14
甲酸脱氢催化剂设计.....	15
周期体系电子结构计算的量子算法.....	16
Theoretical Design of Two-Dimensional Dirac Materials: <i>Models, Materials and Applications</i> .....	17
Pseudo-Hermitian magnon polariton system.....	18
Determining and improving the kinetic stability of energy-rich molecules.....	19
含硼多面体核-壳团簇：可能的储氢材料.....	20
Towards computational design of chemical reactions with reaction phase diagram.....	21
金属团簇及其反应性的实验与理论研究.....	21
优异电催化材料的高通量计算与筛选.....	23
二维材料设计及电催化机理研究.....	24
中性团簇红外光谱研究.....	25
应力对材料体系结构和析氢催化性能的调控.....	26
双齿配体对过渡金属氢氧化物析氧性能调控的理论研究.....	27
二维材料预测及其在能源和催化的应用.....	28
CNMGE 高通量材料计算平台与材料大数据应用管理系统.....	29

反应环境中的纳米材料原位可塑性.....	30
低维材料的活性和光生载流子动力学性质的优化调控.....	31
基于固态储能应用的低维材料理论设计与性质研究.....	32
Reversible cycling of graphite electrode in propylene carbonate electrolyte enabled by ethyl isothiocyanate.....	33
高效 MOF 光催化材料的理论预测.....	34
理论设计和靶向合成无金属二维 C <sub>4</sub> N-COF 光电催化 OER 催化剂.....	35
Activity of nanomaterials in catalytically tuning reactive oxygen species.....	36
华信鼎成 HPC 解决方案及产品介绍.....	37
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.....	38
复合催化剂的理论研究.....	39
基于图注意力网络的团簇性质预测.....	40
Cr 基二维材料的层间磁性与层状超分子晶体中的电荷序.....	41
二维材料中新奇能谷物理的理论探索.....	42
材料计算中电子轨道的实空间分析.....	43
光照下的角动量流.....	44
亚 10 nm 晶体管研究进展.....	45
基于分子的低维磁性材料的理论设计.....	46
纯无机钙钛矿材料中缺陷容忍性的第一性原理计算研究.....	47
金属-多层二维半导体异质结中的费米能级退钉扎.....	48
碘化物二维磁性材料及其输运性质.....	49
纳米尺度材料与器件热、电输运与热电转换机理研究.....	50
Topological quantum states in two-dimensional magnets.....	51
复杂应变下强共价材料的结构和物性调控.....	52
类黑磷二维热电材料的结构设计：尺寸优化与界面调控.....	53
理论模拟在水泥熟料合成中的应用.....	53
二维金属基化合物的结构与性能研究.....	55
基于无轨道密度泛函理论的 ATLAS 计算方法与软件.....	56
单层和少层磷烯边界重构对制备和电子性质的影响.....	57
二维结构预测发现特定拓扑、功能材料及机制.....	58
Charge doping induced two-step reversible structural phase transitions and electromechanical actuation in two-dimensional 1T'-MoS <sub>2</sub> .....	59

Engineering the anion ordering and ferroelectricity in heteroanionic perovskite for photocatalytic and photovoltaic applications.....	60
半经典广义朗之万分子动力学.....	61
计算理解内嵌金属富勒烯.....	62
巯基金纳米团簇的结构机制的理论探索.....	63
酸性电解水催化剂的理论设计与模拟.....	64
基于第一性原理计算的钙钛矿氧化物 OER 的机器学习研究.....	65
气相金属氢化物团簇活化转化 CO <sub>2</sub> .....	66
低维碳材料电化学催化剂的理论设计.....	67
铜系离子水团簇的饱和配位数研究.....	68
铅合金腐蚀的第一性原理研究：从初始氧化到氧化膜性质.....	69
钙钛矿光生电荷动力学.....	70
Unconventional untrahigh piezoelectricity in two-dimensional mixed-valence ferroelectrics and hydrogen-bonded ferroelectrics.....	71
二维拓扑量子材料的理论设计及其外场调控.....	72
二维“半”负泊松比材料的第一性原理预测.....	73
Tunable bending modulus of graphene oxide.....	74
插层构筑设计二维材料家族 MA <sub>2</sub> Z <sub>4</sub> ：具有拓扑、磁性和超导等特性.....	75
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.....	76
恒电势条件下电催化反应活性的理论预测与动力学模拟.....	77
金属纳米粒子生长动力学理论.....	78
仿生[NiFe]氢化酶催化质子还原反应机制的理论研究.....	79
Metal synergistic effects on CO <sub>2</sub> reduction over bimetallic electrocatalysts.....	80
复杂应变下金刚石的力学行为与电子传导特性.....	81
石墨烯中不同原子配位环境对单个金属活性的调控研究.....	82
The Story of Contact Angles.....	83
二维材料纳米结构的生长/刻蚀机理与可控制备.....	84
动力学模拟在催化反应机理研究中的应用与发展.....	85
Design and Catalytic Performance of Heptazine-Based Carbon Nitrides.....	86
二维拓扑聚合物的能带结构工程及其在光解水中的应用.....	87
掺杂碳基催化剂催化氧还原活性与稳定性机理研究.....	88
CN-Based Single-Atom-Catalysts towards N <sub>2</sub> Reduction Reaction.....	89



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.....	90
基于结构描述符的多相催化剂设计.....	91
The hydrogen evolution reaction of D-MXenes: Ab initio calculations.....	92
Single-atom electrocatalysts for energy and environmental materials.....	93
单原子催化剂中的自旋磁矩描述符.....	94
多尺度摩擦化学-连结第一性原理计算到实验.....	95
High Throughput Screening for Fast Li-Ion Conductors.....	96
电池与电催化过程中的界面能问题.....	97
Lithium Bonds in Lithium Batteries.....	98
锂硫电池的催化反应动力学调控研究.....	99
Carbon fragments as highly active metal-free catalysts for the oxygen reduction reaction: a mechanistic study.....	100
尿素电化学合成催化剂的设计与模拟.....	101
轨道调控表界面催化.....	102
二维 MX <sub>2</sub> 晶界的“表情包”.....	103
The rising of intrinsic magnetic topological insulators MnBi <sub>2</sub> Te <sub>4</sub> /(Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> ) <sub>n</sub> .....	104
半导体磁双层膜中的谷劈裂.....	105
几种热电材料的第一性原理计算和中子散射研究.....	106
二维材料狄拉克锥形成的六次对称性根源.....	107
MXenes 基材料的电子性质、催化和磁性性能调控的理论研究.....	108
低碳烷烃催化转化过程的理论计算模拟.....	109
用于选择性制备丙烯的催化剂的设计与机理研究.....	110
一氧化碳/氮还原光电催化剂设计.....	111
非金属碳基材料促进 SO <sub>2</sub> 的 O <sub>2</sub> 分子非解离氧化.....	112
Tuning the interfacial polarization fields of single-atom catalysts by combining hexagonal boron nitride and graphene support.....	113
二维储能材料生长机制的理论研究.....	114
Natural layered materials as ideal optical hyperbolic media.....	115
二维材料的生长机制探究.....	116
核壳纳米材料的理论设计.....	117
水界面物理化学过程的多尺度模拟.....	118
Intermolecular hydrogen-bonding of confined water.....	119

多孔冰相预测及其储氢性能研究.....	120
碳氮二维材料的结构与性质调控.....	121
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.....	122
经济、高效、稳定单原子尺度催化剂设计的理论计算研究.....	123
Non-negligible effects of electrochemical environment factors in density functional theory calculation.....	124
Theoretical Investigation on the Electronic Properties of Monochalcogenide based on Main-group Metal.....	125
氮化碳等光催化体系的计算模拟.....	126
二维材料中铁电序和磁序、拓扑序的耦合效应.....	127
Tunable Magnetic Anisotropy and Topological Spin Textures in a Janus $MnBi_2(Se, Te)_4$ Monolayer.....	128
新型二维材料在能源领域的应用与凝聚态化学.....	129
尖晶石 $LiMn_2O_4$ 中本征点缺陷性质的第一性原理计算研究.....	130
高压超导氢化物的结构设计.....	131
$Fe_3O_4$ 体相、表面及纳米粒子亚铁磁体系的第一性原理研究.....	132
高熵合金的第一性原理计算研究.....	132
PWmat 在纳米、能源材料计算中的应用.....	134
基于密度泛函方法的锂硫电池催化材料理论研究.....	135
Machine learning and Simple descriptors for high activity and selectivity bimetallic atomic catalysts towards $CO_2RR$ .....	136
钙钛矿型复合光催化材料的界面结构与反应微观机制.....	137
$GaS/g-C_3N_4$ 异质结光电特性的第一性原理研究.....	138
非金属催化剂用于高效一氧化氮还原产氨.....	139
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.....	140
Anti-MXenes from Non-van der Waals Bulks for Electrochemical Applications: The Merit of Metallicity and Active Basal Plane.....	141
Doped carbon materials for oxygen electro-catalysis.....	142
固体材料中的拓扑声子态.....	143
非对称二维材料的二阶非线性光学响应.....	144
基于团簇组装设计磷基纳米材料.....	145

钙钛矿光生载流子动力学理论计算.....	146
双层 $\text{MBi}_2\text{Te}_4$ ( $M = \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$ ) 中层堆叠方式决定的拓扑相.....	147
双层晶格中的铁弹-铁电多铁.....	148
磁方向控制的单层铁磁 $\text{NpSb}$ 拓扑晶体绝缘相与二阶拓扑相的转变.....	149
晶体对称性破缺导致的谷极化.....	150
“三铁性” $\text{CrI}_2$ 单层—结合 Jahn-Teller 畸变和界面效应.....	151
Excitonic Instability and Electronic Property of Two-dimensional materials.....	152
Electric field control of molecular magnetic state by two-dimensional ferroelectric heterostructure engineering.....	153
Ideal topological semimetal in bulk boron allotropes.....	154
$\text{Cu}_2\text{N}$ 和 $\text{CuN}_2$ 单层作为 $\text{CO}_2\text{RR}$ 的高效电催化剂.....	155
二维 $\text{Ti}_2\text{C}$ 吸附肺癌气体标志物乙苯的第一性原理研究.....	156
$2\text{H-MoTe}_2$ 和 $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ 面内异质结的第一性原理研究.....	157
二维 $g\text{-CN}$ 负载的单原子催化剂用于电催化氮还原的研究.....	158
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.....	159
$\text{C}_3\text{N}_5$ 多层: 一种可全解水的无金属高效催化剂.....	160
铂在二氧化铈晶界表面上偏聚性质的理论研究.....	161
$\text{H}4,4,4\text{-graphyne}$ 用于双功能单原子催化剂的理论研究.....	162
过渡金属吸附调节 Cr 基 MXenes 氧电子轨道占据以提高 HER 活性.....	163
缺电子体系对 Na 原子吸附强弱的机理研究---以 $\text{MoS}_2$ 为例.....	164
具有高居里温度的二维 $\text{MnB}_6$ 单层的第一性原理探究.....	165
过渡金属二聚体锚固 $\text{C}_2\text{N}$ 作为双原子催化剂在锂硫电池中的应用.....	166
DFT 计算 Z-型异质结 $g\text{-CN/MXene}$ 光催化降解 VOCs 的机理研究.....	167
Janus 三族硫属化物单层的非线性光学效应.....	168
Understanding the organic photovoltaic properties of the fused ring electron acceptor with decacyclic core.....	169
金属二硼化物中的长寿命的等离激元模和增强的超导特性.....	170
Dirac Semimetals in Homogeneous Holey Carbon Nitride Monolayers.....	171
边缘管状重构磷烯纳米带的空间电荷分离.....	172
The Defect Chemistry of Carbon Frameworks for Regulating the Lithium Nucleation and Growth Behaviors in Lithium Metal Anodes.....	173
Theoretical investigations on two-dimensional carbon-based materials as cathode catalysts in lithium oxygen batteries.....	174

Theoretical design of nitrogen-doped graphene supported Platinum single-atom for full ammonia borane hydrolysis.....	175
二维晶格中稳定的谷-层耦合及设计理念.....	176
Quantum Anomalous Hall Effect of Dirac Half-metal Monolayer $TiCl_3$ with High Chern Number.....	177
Strain and electric field tuned electronic and photoelectric properties of SeWS/h-BP van der Waals heterostructures.....	178
Molecular Mechanisms and Atmospheric Implications of Criegee Intermediate-Alcohol Chemistry in the Gas Phase and Aqueous Surface Environments.....	179
Efficient Direct Band Gap Photovoltaic Material Predicted Via Doping Double Perovskites $Cs_2AgBiX_6$ ( $X = Cl, Br$ ).....	180
Sulfur stabilizing metal nanoclusters on carbons at high temperatures.....	181
Pb-WSe <sub>2</sub> 吸附体系中非常规的 Rashba 型和 Zeeman 型自旋劈裂.....	182
铁电-顺电转换对二维铁电材料光解水性能的调控.....	183
X 型石墨烯纳米带的二阶非线性光学性质的理论研究.....	184
液态电解液介电常数变化的化学本质与微观机制.....	185
Gas Detection for NO <sub>2</sub> and SO <sub>2</sub> Based on Tape- Heme Monolayer.....	186
硅基 $MSi_2N_4$ ( $M = Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo$ 和 $W$ ) 单层膜中有效 NRR 电催化剂的筛选.....	187
Cr <sub>2</sub> C MXene 材料电子性质和磁性的第一性原理研究.....	188
二维 $M_3(C_6S_3O_3)_2$ 作为导电氧还原反应(ORR)催化剂.....	189
Effects of inherent defects on the properties of 2D BAs.....	190
Two-dimensional GaN/WSe <sub>2</sub> van der Waals Heterostructures for electronic properties and photocatalytic.....	191
二维过渡金属硼化物作为电催化剂的理论研究.....	192
Bi-Atom Active Sites Embedded in A Two-Dimensional CovalentOrganic Framework for Efficient Nitrogen Reduction Reaction.....	193
Ring Model: Structural Insights into the Interfacial Interactions between $SR[Au(SR)]_x$ ( $x = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) Protection Motifs and Gold Cores in Thiolate-Protected Gold Nanoclusters.....	194
Two-Dimensional Growth Mode of Thiolate-Protected Gold Nanoclusters.....	195
High-performance Spin Filters and Spin Field Effect Transistors Based on Bilayer VSe <sub>2</sub> ....	196
Transition Metal Atoms (Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Doped RuIr Surface for the Hydrogen Evolution Reaction: A First-Principles Study.....	197
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.....	198

Can ultra-thin Si FinFETs work well at the sub-10 nm gate-length region?.....	199
天然醌类分子作为固态金属电池电极材料的理论研究.....	200
氢氘同位素效应对 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 钙钛矿电子空穴复合的影响.....	201
二维 Ruddlesden-Popper 钙钛矿中光激发载流子动力学研究.....	202
二维 GeAs 与金属接触的界面性质的研究.....	203
“On-off-on” Fluorescence Switch of Graphene Quantum Dots: A Cationic Control Strategy .....	204
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.....	205
Accurate Electronic Properties and Nonlinear Optical Response of Two-dimensional $\text{MA}_2\text{Z}_4$ .....	206
Ultra-high piezoelectric coefficients and strain-sensitive Curie temperature in hydrogen-bonded ferroelectrics.....	207
Bandgap engineering of two-dimensional $\text{C}_3\text{N}$ bilayers.....	208
A Family of Ionic Supersalts with Covalent-like Directionality and Unconventional Multiferroicity.....	209
Rational design of 2D organic magnets with giant magnetic anisotropy based on two-coordinate 5d transition metals.....	210
单层 $\alpha$ 相正交褶皱结构普适的管状边界.....	211
Layer-dependent magnetic phase diagram in $\text{Fe}_n\text{GeTe}_2$ ( $3 \leq n \leq 7$ ) ultrathin films: coexistence of localized and itinerant electronic states of Fe with variable valence.....	212
g- $\text{C}_3\text{N}_4$ Derivative Artificial Organic/Inorganic Composite Solid Electrolyte Interphase Layer for Stable Lithium Metal Anode.....	213
Two-dimensional Multiferroic $\text{FeCl}$ with Room Temperature Ferromagnetism and Tunable Magnetic Anisotropy via Ferroelectricity.....	214
N-heterocyclic carbene in low-dimensional carbon allotropes: from carbon nitride to NRR catalyst.....	215
IrW nanochannel support enabling ultrastable electrocatalytic oxygen evolution at $2 \text{ A cm}^{-2}$ in acidic media.....	216
Expanded Porphyrin Nanosheet for Metal-free Photocatalytic Water Splitting Using Visible Light.....	217
第 IV 族类蓝磷相单硫化物本征压电性的理论研究.....	218
$\text{Cu}/\text{TiO}_2$ 单原子水分解催化剂的活性起源.....	219
钙钛矿铁弹畴壁光生载流子动力学的理论计算.....	220
Topological quadrupole phase in two dimensional $\text{C}_2\text{N}$ .....	221



The effect of axial O atom on the catalytic mechanism of NiN <sub>4</sub> single-atom catalysts in CO <sub>2</sub> RR: An ab initio molecular dynamics study.....	222
层状插入金属基材料固氮催化剂的理论设计及机理研究.....	223
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.....	224
Crown ethers in hydrogenated graphene.....	225
锂空电池正极材料以及分子添加剂的 DFT 理论研究.....	226
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.....	227
Electronic and photocatalytic performance of boron phosphide-blue phosphorene vdW heterostructures.....	228
Magnetic field modulated photoelectric devices in ferromagnetic semiconductor CrXh (X = S/Se, h = Cl/Br/I) van der Waals heterojunctions.....	229
实际材料 C <sub>3</sub> N 中的高阶拓扑声子研究.....	230
水在钒团簇上析氢反应机理.....	231
Performance limit of Monolayer MoSi <sub>2</sub> N <sub>4</sub> Transistors.....	232
The Effect of Doping Engineering on the Electronic Structure of Metastable β-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> : A GGA+U Viewpoint.....	233
The effects of vacancy and heteroatoms-doping on the stability, electronic and magnetic properties of blue phosphorene.....	234
Ferromagnetic Dirac Half-Metallicity in Transition Metal Embedded Honeycomb Borophene.....	235
A two-dimensional ferromagnetic metallic material containing planar hexacoordinate Fe atom.....	236
The Effect of Vacancy on Magnetic properties in Monolayer VSe <sub>2</sub> .....	237
Nb <sub>11</sub> O <sub>15</sub> -超原子团簇的气相合成.....	238
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.....	239
Pykp: A toolkit to construct the k-p model at a high symmetry point.....	240
石墨烯/金属界面 Wiedemann-Franz 定律与量子输运.....	241
Mechanism of Nitrogen Doping Concentration Promotion on Nitrogen-Doped Carbon Materials.....	242
Non-metal atoms doped on BSe monolayer as a promising electrocatalysts for hydrogen evolution reaction (HER).....	243
First-principles exploring isovalent substitution in Li <sub>3</sub> In <sub>1-x</sub> Sc <sub>x</sub> Cl <sub>6</sub> as fast ionic conductor....	244
三原子金属团簇催化氮气活化与转化的研究.....	245
调控卤氧化铋界面光生载流子分离与复合用于固氮.....	246

MBenes:用于氮还原反应(NRR)的新型电化学催化剂.....	247
基于过渡金属掺杂蓝磷/MoSe <sub>2</sub> 的范德华异质结的第一性原理探究.....	248
遗传算法在 ZnO 表面 H <sub>2</sub> O 吸附构型研究中的应用.....	249
不同状态下 CeO <sub>2</sub> (100)表面催化 CO 氧化反应的理论模拟研究.....	250
2D V–VI Binary Nanosheets with Square Lattice: A Theoretical Investigation.....	251
A Library of Two-Dimensional Square Disulfide Monolayers via Computational Explorations .....	252
Revisiting the Catalytic Activity of double-atom catalysts for Oxygen Reduction Reaction from the First Principles Considering Magnetic Coupling.....	253
Polyoxometalate Cluster Based Single-Atom Catalyst with High Performance for Water Splitting and Oxygen Reduction Reaction.....	254
硫化物电解质中的力学–化学耦合.....	255
Slater Koster parametrization for the phonons of monolayer MoX <sub>2</sub> .....	256
Effects of the Introduced in-Gap Bands on Photoluminescence of Cs <sub>2</sub> XCl <sub>6</sub> (X = Sn, Ti, Zr, Hf) Perovskites: A First-Principles Study.....	257
第一性原理计算在离子电池电极材料研究中的应用.....	258
二维 MOFs 中配体和应力调控析氢性能.....	259
二维 CuInP <sub>2</sub> S <sub>6</sub> 用于光催化水分解的探究.....	260
Janus ZrSSe 和 HfSSe 的纵向和横向异质结构的电子性质.....	261
Stable Multifunctional Single-atomic Catalysts Resulted from the Synergistic Effect of Anchored Transition-metal Atoms and Host Covalent-organic Frameworks.....	262
Electronic structure and enhanced photocatalytic properties in Ca(OH) <sub>2</sub> /GeC van der Waals heterostructure.....	263
Ideal topological phononic nodal chain in K <sub>2</sub> O materials class.....	264
A novel carbon-nitrogen Dirac semimetal C <sub>5</sub> N <sub>4</sub> monolayer.....	265
Fully spin-polarized nodal chain state in V <sub>2</sub> Zn <sub>4</sub> O <sub>8</sub> spinel half metals.....	266
TM 单层修饰的 MXene 的稳定性和 ORR/OER 双功能催化研究.....	267
First principles study, geometry and electronic structure of two-dimensional Nb <sub>2</sub> CT <sub>x</sub> mxenes .....	268
理论计算评价光催化剂 VOCs 降解性能: g-C <sub>3</sub> N <sub>4</sub> dots/graphene 为例.....	269
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.....	270
氮掺杂石墨炔-MXene 复合结构: 高效的双功能电催化剂.....	271
单层 SiAs 与金属界面性质的第一性原理研究.....	272

预测 MoSi <sub>2</sub> N <sub>4</sub> 单层在光催化方面的应用前景.....	273
Interlayer exciton properties of MoSSe/WSSe heterostructure.....	274
The electronic structures and related properties of PBDB-T:IT-2X (X= H, F, Cl, Br) organic photovoltaic heterojunctions.....	275
CdS/WS <sub>2</sub> 异质结带阶和电子结构的第一性原理研究作者: 王梦霞.....	276
二维多铁范德华异质结构的设计与性能调控.....	277
Exciton states in Chiral Graphene Nanoribbons.....	278
Fully Boron-Sheet-Based Field Effect Transistors from First- Principles: Inverse Design of Semiconducting Boron Sheets.....	279
First-Principles Study on The Electron-Phonon Interaction And Transport Properties in Two-Dimensional BeP <sub>2</sub> C.....	280
The structural, mechanical and optical properties of ternary mixed crystals In <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As with zinc-blende structure by first-principle calculations.....	281
The electron-phonon interaction of Cs-based inorganic halide perovskites (CsSnBr <sub>3</sub> , CsSnCl <sub>3</sub> ).....	282
The electron-phonon interaction of LiAlTe <sub>2</sub> .....	283
Machine Learning Force Field Simulations of Carbon Systems Based on First-Principle Calculations.....	284
Machine learning force field simulations of sulfur systems based on first-principles calculations.....	285
过渡金属原子负载在 MoSe <sub>2</sub> 纳米片作为高效催化剂的理论研究.....	286
Effect of Graphene and MoS <sub>2</sub> In-Plane Heterojunction Interface on Transport Properties...	287
Intrinsic Spin Hall Conductivity Platform in Triply Degenerate Semimetal.....	288
SOFC 连接体合金表面初步氧化的分子动力学模拟.....	289
Valley polarization properties in two-dimensional H-Tl <sub>2</sub> O/CrI <sub>3</sub> heterostructure.....	290
A comparative study of machine learning of force fields between neural network and linear regression models.....	291
WO <sub>3</sub> -TiO <sub>2</sub> 混合材料薄膜的光伏储能效应.....	292
二维碳硫材料作为钾离子电池的阳极材料.....	293
宽带隙 P-S 单层: 具有各向异性和超高载流子迁移率.....	294
Strain Induced Ideal Topological Semimetal in Ort-B <sub>32</sub> with Parallel Arc-Like Nodal Lines and Anisotropic Multiple Weyl Fermions.....	295
Non-equilibrium Green's function formalism for magnon-phonon scattering in three-dimensional nanostructure.....	296

通过量子干涉效应调控纳米体系输运行为.....	297
Methane Conversion on Metal Dimer Embedded Phthalocyanine Sheet: A Theoretical Study .....	298
First-principles study on the optoelectronic properties of Ga vacancy correlation point defects in GaN.....	299
Tunning the transport properties of a-GeTe by uniaxial strain engineering.....	300

报告题目：物理学是灯：照亮了新材料设计的路

报告人：孙强

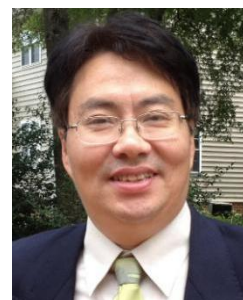
北京大学 [sunqiang@pku.edu.cn](mailto:sunqiang@pku.edu.cn)

摘要：

自从亚里士多德提出物理学的概念以来，经伽利略、牛顿、麦克斯韦、爱因斯坦、普朗克、海森伯、薛定谔等物理大师们的建造，物理学为现代科学技术的发展提供了直接的推动力，并成为指引其它学科和技术革新的明灯。本报告鉴于新材料是一切高新技术的物质载体，在能源、环境、信息技术等前沿领域中必不可少，我们将结合实际研究示例，讨论如何运用物理学思想和物理学原理去设计新材料包括二维磁性材料、储氢材料、热电材料、CO<sub>2</sub>转化材料、和新型离子电池材料，以激励学生学好物理并创造性地应用于与国民经济和国家重大战略需求密切相关的高新技术领域，以物理助推中国梦的实现。

个人简介：

孙强，北京大学教授，博士生导师。1984年7月于西南大学获物理学学士学位，1987年7月于四川大学获理论物理硕士学位，1996年10月于南京大学获凝聚态物理博士学位。他长期从事新材料的计算模拟，包括团簇及组装材料、二维材料、储氢材料、电池材料、热电材料及二氧化碳转化材料。曾获日本金属学会颁发的优秀研究成果奖；曾担任美国物理联合会 (American Institute of Physics, AIP) 主办的 <Journal of Renewable and Sustainable Energy> Associate Editor。2020年入选全球前2%顶尖科学家（生涯影响力）榜单。





## 报告题目：XYG3 型双杂化泛函：从分子到材料

报告人：徐昕

复旦大学 [xxchem@fudan.edu.cn](mailto:xxchem@fudan.edu.cn)

### 摘要：

材料的合成传统上是采用试错法。人们依据一定的经验，尝试各种实验方案，以期制备出想要得到的新材料。另一方面，世界上已经有成千上万的材料被合成出来，但人们并没有真正详细测量、研究过它们的各种性质。现如今，计算机建模、详细计算、并进一步利用机器学习技术，已经逐渐成为材料研究的新范式。人们根据所需要的性能，通过计算，预测出相应的候选材料。而且，人们也并不需要真正地合成出一个材料、或者对一个材料进行真正的测量，计算可以预言它的各种性质。计算已经成为材料基因工程的重要组成部分，积累了大量的数据，加快了新材料的研发速度和效率。几年前，Nature 封面刊登了题为《人工智能可以创造更优秀的材料吗？》(《Can artificial intelligence create the next wonder material?》) 的文章，憧憬人工智能将可能给材料科学带来的革命性改变，在欢呼“我们终于看到了理论能给的，就是实验想要的”的同时，对理论工作者发出了“事实上，一些误差来源于理论本身，而我们可能永远无法修正这样的误差”的灵魂拷问。<sup>[1]</sup> 众所周知，密度泛函理论已经成为计算化学、计算物理和计算材料等学科领域中最重要、基于第一性原理的计算方法，而其中双杂化泛函是新一代、可兼顾精度和效率的密度泛函近似方法。双杂化泛函克服了目前常用泛函（如杂化泛函）在共价分子生成热、反应能垒和弱相互作用等各方面的缺陷，取得了可以和昂贵的高等级从头算方法相媲美的结果。<sup>[2,3]</sup> 尽管双杂化泛函已广泛地被应用于不同类型的复杂大分子体系的研究，然而，目前却鲜有双杂化泛函在计算材料领域的应用。究其原因，一方面，双杂化泛函在周期性边界条件下的程序开发极具挑战性；另一方面，因双杂化泛函的开发时仅关注于分子体系，其在周期性体系能否继续有优异表现还未被证实。近年来，我们课题组成功实现了双杂化泛函的周期性计算功能。<sup>[4,5]</sup> 系统的测评显示，双杂化泛函可以准确描述包括分子晶体、原子晶体和离子晶体等不同类型的材料体系，有望用于产生高质量的材料数据，从而突破现有计算的困境，进一步夯实计算模拟作为材料研究的新范式在材料领域的基础性地位。

### 参考文献：

- [1] N. Nosengo, *Nature*, **533**, (2016) 23-25;
- [2] Y. Zhang, X. Xu, and W.A. Goddard, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **106**, (2009), 4963-4968;
- [3] I. Y. Zhang, X. Xu, Y. Jung, and W.A. Goddard, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **108**, (2011), 19896-19900;
- [4] B. Chen, X. Xu, *J. Chem. Theory Comput.* **16** (2020), 4271-4285;
- [5] Y Wang, Y. Li, J. Chen, I. Y. Zhang, X. Xu, *JACS Au* **1** (2021), 543-549.

### 个人简介：

徐昕教授，毕业于厦门大学，现为复旦大学化学系教授。他长期从事电子结构理论方法开发及应用方面的基础研究，发表专业学术期刊论文 200 余篇；撰写出版的题为《新一代密度泛函》(A New-Generation Density Functional) 专著 (Springer)，是国际上第一部有关双杂化泛函的专著；应邀在国际知名大学或重要学术会议上做学术专题报告 200 余次；曾荣获教育部自然科学奖一等奖 1 项；从 2020 年起，担任国际期刊《JACS Au》理论方向主编。



## 报告题目: **Interplay of Experiment, Theory and Computation in Modern Chemistry**

报告人: 李隽

清华大学 [junli@tsinghua.edu.cn](mailto:junli@tsinghua.edu.cn)

### 摘要:

With the development of relativity and quantum mechanics, the fundamental theoretical foundation of chemical science has been well founded. The emergence of computation science and technology has brought chemistry into a new era where experiment and theory can work together. Computational chemistry has now become an essential part of modern chemistry, and chemistry is thereby no longer a purely experimental science. In this talk, we will provide an overview on the importance of close interplay of experiment, theory and computation. Successful examples will be presented involving the findings of actinide-noble-gas bonding,<sup>[1]</sup> Au<sub>20</sub> nanocluster,<sup>[2]</sup> borophene (B<sub>36</sub>, B<sub>35</sub>)<sup>[3]</sup> and borospherene (B<sub>40</sub>),<sup>[4]</sup> and single atom catalysts.<sup>[5]</sup> A perspective will be given to the future development of achieving atomically precise heterogeneous catalysis with close collaboration between experiment and theory.

### 参考文献:

- [1] J. Li, B. E. Bursten, B.-Y. Liang, L. Andrews, "Noble Gas-Actinide Compounds: Complexation of the CUO Molecule by Ar, Kr, and Xe Atoms in Noble Gas Matrices", *Science*, 2002, 295, 2242 – 2245.
- [2] J. Li, X. Li, H.-J. Zhai, L.-S. Wang, "Au<sub>20</sub>: A Tetrahedral Cluster", *Science*, 2003, 299, 864–867.
- [3] Z. A. Piazza, H.-S. Hu, W.-L. Li, Y.-F. Zhao, J. Li, L.-S. Wang, "Planar Hexagonal B<sub>36</sub> as a Potential Basis for Extended Single-Atom Layer Boron Sheets", *Nature Commun.*, 2014, 5, 3113.
- [4] H.-J. Zhai, Y.-F. Zhao, W.-L. Li, Q. Chen, H. Bai, H.-S. Hu, Z. A. Piazza, W.-J. Tian, H.-G. Lu, Y.-B. Wu, Y.-W. Mu, G.-F. Wei, Z.-P. Liu, J. Li, S.-D. Li, L.-S. Wang, "Observation of an All-Boron Fullerene", *Nature Chem.*, 2014, 6, 727-731.
- [5] B. Qiao, A. Wang, X. F. Yang, L. F. Allard, Z. Jiang, Y. Cui, J. Liu, J. Li, T. Zhang, "Single-Atom Catalysis of CO Oxidation Using Pt<sub>1</sub>/FeO<sub>x</sub>", *Nature Chem.* 2011, 3, 634.

### 个人简介:

Professor Li is a theoretical and computational chemist. He received a PhD in Chinese Academy of Sciences in 1992 and did postdoctoral research in Germany and USA. He then worked in the Pacific Northwest National Laboratory, USA for over ten years as a senior research scientist and chief scientist. He joined Tsinghua University as a ChangJiang Chair Professor in 2009 and is an elected AAAS Fellow and CCS Fellow. Prof. Li is currently the director of the Theoretical Chemistry Center, Tsinghua University. He works in the fields of quantum heavy-element chemistry, computational catalysis, and theoretical cluster science with ~400 publications and ~30,000 citations.



**报告题目： Band Structure Engineering and Defect Control for  
Energy and Optoelectronic Applications**

**报告人：魏苏淮**

北京计算科学研究中心 [suhuaiwei@csrc.ac.cn](mailto:suhuaiwei@csrc.ac.cn)

**摘要：**

First-principles study of semiconductor materials plays an important role in developing clean energy and information technologies because it can provide useful physical insights, fresh perspective and new design principles for developing innovative semiconductor materials with high performance. One of the most important issues in studying semiconductor material is to accurately calculate its band structure, predict its defect properties, and continuously tune its material properties through band structure engineering and defect control. In this talk, I will discuss how the development of theoretical first-principles calculation methods can be used to better understand and improve the performance of energy and optoelectronic devices.

**个人简介：**

魏苏淮教授现任北京计算科学研究中心讲座教授、材料与能源研究部主任，国家特聘专家，国家重点专项首席科学家，国家自然科学基金重大项目负责人，美国物理学会会士（APS Fellow），美国材料学会会士（MRS Fellow）。1981年本科毕业于复旦大学，1985年在美国威廉玛丽学院取得理学博士学位，1985年-2015年，在美国可再生能源国家实验室(NREL)历任博士后、科学家、资深科学家、首席科学家、理论研究室主任，实验室Fellow。在半导体能带理论、缺陷与合金物理、能源与光电材料设计、计算方法等方面取得了系统的原创性成果。已发表SCI论文520余篇，包括72篇PRL。论文引用60000多次，H因子122。



报告题目: **Encyclopedia of emergent particles in  
three-dimensional crystals**

报告人: 姚裕贵

北京理工大学 [ygyao@bit.edu.cn](mailto:ygyao@bit.edu.cn)

**摘要:** The past decade has witnessed a surge of interest in exploring emergent particles in condensed matter systems. Novel particles, emerged as excitations around exotic band degeneracy points, continue to be reported in real materials and artificially engineered systems, but so far, we do not have a complete picture on all possible types of particles that can be achieved. Here, via systematic symmetry analysis and modeling, we accomplish a complete list of all possible particles in time-reversal-invariant systems. This includes both spinful particles such as electron quasiparticles in solids, and spinless particles such as phonons or even excitations in electric-circuit and mechanical networks. We establish detailed correspondence between the particle, the symmetry condition, the effective model, and the topological character. This obtained encyclopedia concludes the search for novel emergent particles and provides concrete guidance to achieve them in physical systems.

**个人简介:**

姚裕贵, 1992年在南开大学获得物理学学士学位, 其后分别获得中科院上海光机所的光学硕士学位(1995)和力学所的力学博士学位(1999)。1999-2003年先后在中科院物理所、Texas大学Austin分校从事博士后研究, 2001-2011年物理所先后任助理研究员、副研究员、研究员, 2011年底调到北京理工大学工作。研究领域为计算物理和凝聚态物理, 主要针对材料中贝里相位效应的科学问题, 发展了反常运输物理量和拓扑不变量的第一性原理计算方法, 并应用于反常运输和拓扑物性的研究; 完成了三维晶体中准粒子的分类并建立了百科。姚在反常霍尔效应、硅烯、石墨烯、拓扑材料与物性等方面的研究成果国际上有重要影响, 被国际同行包括多位诺贝尔奖得主广泛引用; 关于反常运输的部分成果进了教科书, 硅烯研究中提出的理论模型被冠名。姚至今发表SCI论文210余篇【包括 *Phy. Rev. Lett.* (24篇), *Phy. Rev. B/A/E/M*(86篇), 自然子刊(8篇), 其它影响因子>10的顶级期刊论文(15余篇)等】, 总引用15000余次, 单篇最高引用超过1600次, 10篇论文单篇引用超过400次, H指数53。2011年获“中国科学院杰出科技成就奖”、2012年获得国家杰出青年基金资助、并入选2012年度“长江学者特聘教授”计划、2014年度“科技部中青年科技创新领军人才”计划和2016年度“国家万人计划科技创新领军人才”计划, 2017年获北京市高等教育教学成果二等奖, 2018年荣获国家科学技术奖自然科学奖二等奖(第一完成人), 2020年享受国务院政府特殊津贴, 2018-2020年连续入选科睿唯安“高被引科学家”名单。



**报告题目：Recent advances in penta-graphene and  
pentagon-based 2D materials**

**报告人：王前**

北京大学 *qianwang2@pku.edu.cn*

**摘要：**

Based on extensive computational simulations, we proposed penta-graphene (PG), a new 2D carbon allotrope composed of only pentagons. Because of its unique geometrical configuration, penta-graphene exhibits a number of intriguing properties. It is semiconducting and possesses negative Poisson's ratio, ultrahigh ideal strength and tunable lattice thermal conductivity. It can form semiconducting 1D penta-tube when rolled up and transparent 3D semiconducting structures when stacked. Penta-graphene not only realizes the mathematical models that tile the Euclidean plane by using only identical copies of same shape pentagons leaving no gaps and with no overlaps in materials science, but also leads to a paradigm shift in designing 2D materials. Based on the atomic configuration of PG, many other pure pentagon-based 2D materials have been predicted, some of them, like penta-silicene nanoribbons, penta-PdSe<sub>2</sub>, have been synthesized. These materials exhibit interesting properties, and have broad applications. In this talk, we briefly discuss the research advances in this field, providing a bird's eye view on how the structural unit changes the properties and functionalities as pentagons instead of hexagons form the building blocks of 2D materials.

**个人简介：**

王前，北京大学教授，博士生导师，国家重点研发计划政府间科技创新重点专项负责人，SCI学术期刊 *Modern Physics Letters B* 和 *International Journal of Modern Physics B* 副主编。2001年于日本东北大学获博士学位，2011年入职北大并成立独立研究组，建立了新材料计算模拟实验室。近年来，在新型碳材料的计算模拟和自旋电子学材料磁性的理论研究方面取得了一系列具有重要科学意义和国际影响力的突出成就，获2016-2017年度谢希德物理奖，2016年亚洲计算材料协会ACCMS颁发的杰出贡献奖，2021年国际先进材料协会（International Association of Advanced Materials, IAAM）颁发的IAAM Medal；获北京大学优秀博士论文指导教师、北京大学本科教学优秀奖等荣誉。自2014年起，连续入选爱思唯尔“中国高被引学者”榜单；入选2020全球前2%顶尖科学家“生涯影响力”榜单。





## 报告题目：低维量子材料及其异质结的理论设计

报告人：杜世萱

中国科学院物理研究所 [sxdu@iphy.ac.cn](mailto:sxdu@iphy.ac.cn)

### 摘要：

量子材料指的是由于其自身电子的量子力学特性而产生奇异物理特性的材料。量子材料的电子自由度，如自旋、电荷、轨道、晶格等相互关联，在力、热、光、电、磁等方面会表现出非常奇特的物理性质，自上世纪 80 年代关于量子霍尔效应以及高温超导的研究以来，关于量子材料的研究备受关注，近年来的研究主要集中在拓扑绝缘体、自旋电子学、超导、纳米器件等领域。2006 年石墨烯的成功剥离及其新奇物性的发现使得低维量子材料成为近 15 年来的主要研究热点。本报告将主要介绍几种新型二维量子材料及其异质结，包括有机拓扑绝缘体材料、氧化物铁电材料以及过渡金属卤硫族化合物的理论设计、结构物性调控及其在器件中的可能应用等。

### 个人简介：

1992 年北京大学化学系获学士学位；2002 年北京师范大学获得博士学位；2002 年 7 月加入中国科学院物理研究所纳米物理与器件实验室。近年来在新型低维材料设计、界面特性与组装机制、以及功能单元结构物性等方向从事研究，在新型二维材料、固体表面功能分子及其组装结构及物性的原子尺度调控方面展开了较为系统的探索。现阶段主要研究兴趣是在单原子、单电子层次上开展低维功能纳米结构的理论设计、物性调控、机器学习在凝聚态物理中的应用等方面的研究。在 *Science*、*Nature* 系列刊物、*Phys. Rev. Lett.*、*Adv. Mat.*、*Nano Lett.* 等国际一流学术杂志发表 SCI 论文 210 余篇，在国际/国内会议做大会/邀请报告 100 余次。多项工作被选为 *Phys. Rev. Lett.* 的“编辑推荐”文章。相关工作被美国物理学会 *Physics*、英国物理学会 *physicsworld* 和英国皇家化学会 *Nature-Asia Materials* 和 *nanotechweb.org* 等进行了亮点报道。相关成果入选中国科学院十大重大创新成果、中国十大科技进展新闻等。杜世萱研究员获“中国青年女科学家奖”、“谢希德”物理奖，作为研究骨干获得“中国科学院杰出科技成就奖”，入选国家百千万人才工程等。她是英国 *Journal of Physics, Condensed Matter* 杂志编委，第 12 届“中国物理学会学术交流委员会”委员。



## 第十三届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会 K005

### 报告题目：硅基发光理论

报告人：骆军委

中国科学院半导体研究所 [jwluo@semi.ac.cn](mailto:jwluo@semi.ac.cn)

#### 摘要：

光子器件与电子器件集成在同一硅片上的光电子集成技术可以有效解决微电子芯片所面临的诸多难题延续摩尔定律。目前，在硅片上已经研制成功探测器、波导、调制器等光子组件，由于硅不发光导致硅片上的激光器还无法成功，严重阻碍了光电集成技术的发展。硅发光是一个延续了半个世纪的世界难题。我们最近发展了一个普适理论来统一解释为什么硅、锗、金刚石等 IV 族是间接带隙，而所有 II-VI 族半导体是直接带隙，除含铝化合物和 GaP 外的其他 III-V 族半导体都是直接带隙，<sup>[1]</sup> 解释清楚了为什么过去半个多世纪始终无法解决硅基发光的难题。荷兰阿姆斯特丹大学 Tom Gregorkiewicz 教授发现在硅量子点中硅的直接带隙能级随量子点尺寸减小迅速降低，认为当硅量子点足够小时可以实现间接带隙转变为直接带隙，这给实现硅直接带隙发光带来了新的希望。我们揭示在硅量子点中硅的直接带隙仍然发生蓝移，推翻了 Tom Gregorkiewicz 教授认为硅量子点可以实现间接带隙转变为直接带隙的观点，<sup>[2]</sup> 我们揭示硅量子点发光来自直接带隙和间接带隙间的电子态耦合，其发光效率要比 III-V 族直接带隙发光材料低两个数量级以上，否定了硅量子点作为硅基发光的可行性。我们在否定硅量子点的同时也设计出高效发光的硅锗超晶格，其发光效率比文献报道的最高硅锗超晶格提高 50 倍，达到 GaAs 和 InP 等直接带隙材料的 10%。<sup>[3,4]</sup> 最近，考虑到锗的直接带隙只比间接带隙高 0.14 eV，只需要 2% 的张应变就能使锗完成由间接带隙转变为直接带隙实现高效发光，受到锂电池硅锗阳极材料体积最大可以膨胀 400% 的启发，提出往锗中注入锂或惰性气体原子使锗晶格由内而外发生膨胀，实现直接带隙发光的原创方案，该掺杂应变锗直接带隙发光方案完美兼容 CMOS 工艺。

#### 参考文献：

- [1] Lin-Ding Yuan, Hui-Xiong Deng, Shu-Shen Li, Su-Huai Wei\*, and Jun-Wei Luo\*, Unified theory of direct or indirect band-gap nature of conventional semiconductors, *Phys. Rev. B* 98, 245203 (2018).
- [2] Jun-Wei Luo, S.S. Li, I. Sychugov, F. Pevere, J. Linnros, and A. Zunger\*, "Absence of red-shift in the direct band gap of silicon nanocrystals with reduced size", *Nature Nanotechnology* 12, 930 (2017).
- [3] Mayeul dAvezac, Jun-Wei Luo, T. Chanier, and Alex Zunger, "Genetic engineering of a direct-gap and optically-allowed superstructure from indirect-gap Si and Ge materials, *Phys. Rev. Lett.* 108, 027401 (2012).
- [4] L. Zhang, M. dAvezac, Jun-Wei Luo, A. Zunger "Genomic design of strong direct-gap optical transition in Si/Ge core/multishell nanowires", *Nano letters* 12, 984 (2012).

#### 个人简介：

中国科学院半导体研究所研究员，半导体超晶格国家重点实验室副主任，2019 年获得国家杰出青年基金资助。2000 年和 2003 年在浙江大学物理系分别获得学士和硕士学位，2006 年在中国科学院半导体研究所获得博士学位，2007 年至 2014 年在美国可再生能源国家实验室先后担任博士后、永久职位研究员、资深研究员。2014 年在中组部人才项目资助下回到中国科学院半导体研究所工作。骆军委长期从事半导体物理与器件物理研究，旨在通过解决硅基发光和半导体自旋轨道耦合效应太弱这两个核心科学问题，推动光电子集成芯片和半导体量子集成芯片走向应用，替代接近物理极限的半导体微电子集成技术。已经取得多项原创性研究成果，包括提出隐藏自旋极化效应理论并由此开辟隐藏物理 (hidden physics) 领域，设计出多个高效硅基发光材料，揭示硅量子点发光机制等。至今已发表论文 60 余篇，其中最近 5 年以第一作者或通讯作者发表 1 篇 *nature physics*、1 篇 *nature nanotechnology*、2 篇 *PRL* 和 1 篇 *nature comms* 等。在 APS、ACS、E-MRS、ICSNN、JSAP-MRS 等重要国际会议作邀请报告或担任分会主席。



## 报告题目：新型二维铁磁材料的设计与调控

报告人：赵纪军

大连理工大学 [zhaojj@dlut.edu.cn](mailto:zhaojj@dlut.edu.cn)

### 摘要：

近年来，二维铁磁体由于其在自旋电子学器件上的重要应用而受到广泛关注。从器件应用的角度，亟待寻找和设计更多具有高居里温度的铁磁体。我们从 22 种具有较简单晶体结构的过渡金属化合物二维材料出发，进行计算筛选和等电子元素替换，设计出居里温度高达 500 K 的两种二维磁性半导体 CrS<sub>2</sub>Cl 和 CrSeBr，并组装出具有磁光调控特性的层间异质结。我们提出了在二维硼化物和磷化物中寻找二维铁磁材料的思路，设计出 MnB 和 Co<sub>2</sub>P 两类新型二维单层铁磁体。我们还提出了在非化学计量比材料中，利用不成对的 p 电子获得新型 p 态二维磁体，设计出 YN<sub>2</sub> 和 K<sub>2</sub>N 单层铁磁体。最后，我们针对 CrI<sub>3</sub> 双层磁体层间反铁磁耦合的特性，分别提出采用半导体衬底的近邻效应和 Cr/I 原子自插层两种办法调控体系的层内和层间铁磁耦合，将 CrI<sub>3</sub> 双层转变为具有较高的居里温度铁磁体。上述理论结果，为设计和筛选新型二维铁磁材料，调控磁性性质，发展自旋电子学器件提供了思路。

### 个人简介：

赵纪军教授，大连理工大学物理学院院长，三束材料改性教育部重点实验室主任，国务院学位委员会第八届学科评议组成员，兼任 Journal of Cluster Science 等四个 SCI 国际期刊编委。主要研究领域为低维凝聚态物理、计算材料学。发表 SCI 论文 600 余篇，总引用 20000 多次，H 因子 72，入选爱思维尔中国高被引学者、全球顶尖科学家终身影响力榜单前 2 万名（应用物理学科第 413 名）。获国家自然科学基金二等奖 1 项、省部级科技奖 7 项，入选万人计划领军人才、长江学者特聘教授。



**报告题目：Rational design and fabrications of nanomaterials**

**报告人：马晶**

南京大学 *majing@nju.edu.cn*

**摘要：**

In this talk, I will introduce our recent works on theoretical design of nanomaterials with the aid of multi-scale computations using density functional theory (DFT) calculations, molecular dynamics (MD) simulations, and machine learning methods. Some material candidates were fabricated in experiments under the guidance of theoretical predictions.

**个人简介：**

马晶，1992 和 1995 年分别获南京理工大学本科和硕士学位，1998 年在南京大学化学化工学院获博士学位。1998-2000 年作为日本学术振兴会（JSPS）特别研究员在日本岐阜大学进行博士后研究。2000-2005 年任南京大学副教授，2005 年 7 月起，任南京大学化学化工学院教授。曾获得国家自然科学基金委杰出青年基金、教育部“新世纪人才计划”、霍英东青年教师基金等资助。先后获得第九届中国青年女科学家，中国化学会青年化学奖、首届南京青年科技创新奖，江苏省“巾帼建功”标兵等荣誉。担任 Journal of Chemical Theory and Computation、Molecular Physics 和《物理化学学报》期刊编委、中国化学会理论化学委员会委员、中国化学会女化学工作者委员会委员。



## 报告题目：单原子电催化剂的理论设计与合成

报告人：曹达鹏

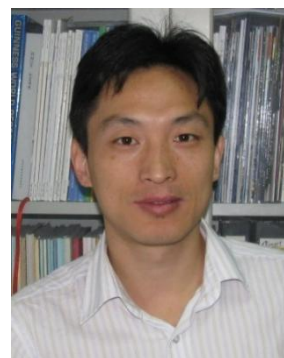
北京化工大学 [caodp@mail.buct.edu.cn](mailto:caodp@mail.buct.edu.cn)

### 摘要：

为了应对化石燃料的紧缺及环境污染,研发新型催化剂用于新能源器件(如氢燃料电池、锌空电池等)已成为迫切的任务。本报告构建了 100 多种单原子催化剂 (SACs) 模型,研究了这些模型催化剂的 ORR/OER/HER 的活性,揭示了载体配位环境对 SACs 的内在影响机制,建立了 SACs 的从“结构到性能”的通用设计原则,并成功筛选出系列高性能 SACs。为了制备出理论筛选的 SACs,提出了表面活性剂辅助的 SACs 通用合成方法,制备出系列非贵金属 SACs 催化剂。其中以 SAC-Fe 为氧 ORR 催化剂组装的酸性质子膜燃料电池和以 SAC-Co 为氧双功能催化剂制备的锌空电池均表现出极佳的应用前景。也首次揭示了 SAC-Fe 催化剂的高催化活性的起因以及 SAC-Cu 催化剂活性位的氧重构催化机制。

### 个人简介：

曹达鹏, 教授、博士生导师。2002 年获北京化工大学博士学位; 先后在香港大学、新加坡纳米材料公司以及美国加州大学 Riverside 从事科研工作。2005 年任北京化工大学教授至今, 现任分子与材料模拟实验室主任。2016 年获国家杰出青年基金、入选英国皇家化学会会士 (FRSC)。兼任中国化学会理事、中国化工学会多个专业委员会的委员、国际期刊 *Engineered Science* 的主编、*Scientific Reports* 等多个期刊的编委。在 *Nature Catal.*, *PNAS*, *JACS*, *Angew. Chem.* 等期刊上发表 SCI 论文 300 余篇, 被 SCI 他引 14000 余次。





## 报告题目：表界面催化氧化的理论研究

报告人：傅钢

厦门大学 [gfu@xmu.edu.cn](mailto:gfu@xmu.edu.cn)

### 摘要：

多相催化是借助高性能材料，在分子和原子水平上对分子的化学键进行重排、对化学态进行重组，其根本是分子在催化剂表面以及载体（或配体）与其形成的多相界面上的相互作用。因此，界面区域的结构、电子特性、以及热力学和动力学特征可能是认识相关催化过程的关键。我们应用密度泛函理论模拟，将着重讨论几个重要的表界面催化氧化体系：1) MoVTeNbO<sub>x</sub> 中的构象问题<sup>[1]</sup>；2) Pd、Pt 基贵金属催化 CO 氧化机理<sup>[2-4]</sup>；3) 晶格 Cl 对丙烯直接环氧化的促进机制<sup>[5]</sup>。我们将密切结合理论和实验，从原子分子水平上阐明界面协同的科学内涵。

### 参考文献：

- [1] Fu, G.; Xu, X.; Sautet, P., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, 51 (51), 12854-12858.
- [2] Chen, G.; Zhao, Y.; Fu, G.; Duchesne, P. N.; Gu, L.; Zheng, Y.; Weng, X.; Chen, M.; Zhang, P.; Pao, C.-W.; Lee, J.-F.; Zheng, N., *Science* 2014, 344 (6183), 495-499.
- [3] Zhao, Y.; Chen, G.; Zheng, N.; Fu, G., *Faraday Discuss.* 2014, 176, 381-392.
- [4] Zhang, H.; Wang, C.; Sun, H.-L.; Fu, G.; Chen, S.; Zhang, Y.-J.; Chen, B.-H.; Anema, J. R.; Yang, Z.-L.; Li, J.-F.; Tian, Z.-Q., *Nature Commun.* 2017, 8, 15447(1-8)
- [5] Zhan, C.; Wang, Q.; Zhou, L.; Han, X.; Wanyan, Y.; Chen, J.; Zheng, Y.; Wang, Y.; Fu, G.; Xie, Z.; Tian, Z., *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142 (33), 14134-14141.

### 个人简介：

傅钢，现为厦门大学化学化工学院教授，博士生导师，催化科学与工程研究所所长。主要的研究领域是纳米表界面催化的理论研究，从事多相催化的理论研究，主要运用密度泛函理论，从实际复杂的催化体系中抽提模型，应用密度泛函理论深入研究复杂催化体系表界面电子结构及其协同催化机制，深入认识表面有机配体对催化加氢选择性的调控机制。2018 年获得国家自然科学基金二等奖《金属纳米材料的表面配位化学》(个人排名第三)，2019 年入选福建省百千万工程，2020 年入选中青年创新领军人才并获聘教育部长江学者特聘教授。先后以第一作者或通讯联系人在 *Science*(2 篇)、*Nature* (1 篇)、*Nature* 子刊(7 篇)、*J. Am. Chem. Soc.* (4 篇)、*Angew. Chem. Int. Ed.* (3 篇)、*Chem* (2 篇)等刊物上发表论文 70 余篇，为 *WIRE Comp. Mol. Sci.* 撰写综述 1 篇，并合作编撰《碳基能源化学》。



## 第十三届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会 K010

### 报告题目：稀土二氧化铈催化材料研究进展

报告人：龚学庆

华东理工大学 [xgong@ecust.edu.cn](mailto:xgong@ecust.edu.cn)

#### 摘要：

我国是稀土资源大国，其开发利用具有重要战略意义。其中，稀土二氧化铈材料被广泛应用于汽车尾气净化，但人们对纳米二氧化铈材料的催化性能构效关系，以及稀土元素特有的高度局域 f 轨道的作用的认识还非常有限，只是笼统的归纳出其在催化过程中可以起到类似“电子储存器”的作用。为深入理解其催化性能，我们采用在位库仑作用校正的密度泛函理论计算（DFT+U），系统研究了二氧化铈多种表面结构、氧缺陷、金属及其他氧化物颗粒负载和相关体系中催化小分子反应的机理。通过计算二氧化铈的主要晶面（111）上产生单氧空穴后的表面电子结构状况，我们发现单空穴的产生可以还原两个表面铈原子，即还原电子被储存在其 4f 轨道中。我们还计算研究了二氧化铈（111）及（110）表面催化氧化 CO 以及还原 NO 的完整反应过程，并考察了表面还原状态对其影响，发现 NO 在二氧化铈（110）表面的迁移与反应过程中，二氧化铈载体可以选择性的向表面物种转移或接收电子以帮助其的吸附与反应。另外，我们的工作还表明，4f 轨道同时还可以作为有效的参考能级来评价二氧化铈基复合催化材料的电子储存和相关催化能力，并且可以在催化加氢反应中起到调控活性氢物种产生的重要作用。

#### 参考文献：

- [1] Wu, X.P.; Gong, X.Q. *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137: 13228.
- [2] Huang, C.; Wang, Z.Q.; Gong, X.Q. *Chin. J. Catal.* 2018, 39, 1520.
- [3] Zhong, S.Y.; Gong, X.Q. *Appl. Surf. Sci.* 2019, 496, 143712.
- [4] Wang, Z.Q.; Wang, D.; Gong, X.Q. *ACS Catal.* 2020, 10, 586.

#### 个人简介：

龚学庆，男，1978 年 2 月出生，理学博士，华东理工大学教授，博士生导师。2000 年获上海交通大学应用化学专业学士学位，2004 年获英国贝尔法斯特女王大学（The Queen's University of Belfast）物理化学专业理学博士学位，2004-2007 年在美国普林斯顿大学（Princeton University）化学系从事博士后研究。2007 年进入华东理工大学化学与分子工程学院工作至今。



龚学庆博士主要从事利用密度泛函理论（DFT）计算进行材料，表面科学以及催化化学等领域的研究工作。2007 年独立开展科研工作以来，已在 *Science*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Phys. Rev. Lett.*、*Nature Comm.*、*Science Adv.* 等国内外期刊发表 SCI 论文 190 余篇，他引近 8000 次，H-index 为 46。作为负责人承担青年、面上、优青、杰青等国家自然科学基金各类项目 5 项，科技部重点专项项目 1 项（课题负责人）、上海市青年科技启明星项目及跟踪各 1 项，以及上海市曙光计划和优秀学术带头人项目。指导毕业博士研究生 14 人、硕士研究生 18 人。

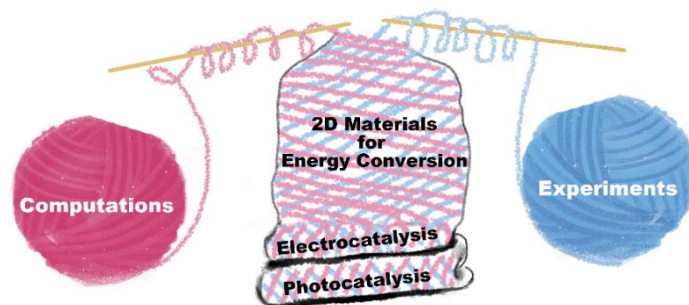
## 报告题目：二维材料在电/光催化实验与计算间架起桥梁

报告人：周震

郑州大学 [zhenzhou@zzu.edu.cn](mailto:zhenzhou@zzu.edu.cn)

### 摘要：

随着实验技术的不断发展，二维材料的制备与表征日趋成熟。此外，二维材料是计算领域非常方便的结构模型。因此，二维材料为计算预测与实验结果提供了连接桥梁，可以把实验和计算结合起来互相验证，一方面有助于解释实验机理，更重要的是可以检验计算方法的可靠性。计算与实验紧密结合会将催化剂的研发逐步转入“计算预测，实验验证”的新型开发模式。



本报告将从多方面总结了计算与实验在二维催化材料上的结合，包括二维催化剂的结构及稳定性、电子结构、有效质量、载流子迁移率、光吸收等，并介绍了利用计算与实验相结合的方法评估光/电催化剂催化活性的指标，包括反应自由能及能垒。另外，还介绍了催化剂描述符。虽然计算与实验结合研究二维电/光催化剂已有长足发展，但目前仍面临诸多挑战。催化反应实际是一个非常复杂的体系，涉及固液界面、电压/光照甚至实时的动态变化。利用分子动力学、各类溶剂模型、恒电势方法及含时密度泛函理论计算等方法可以在一定程度上处理上述问题，然而依然耗时严重。机器学习方法为未来提高计算效率，平衡耗时与准确度提供了一种可能。结合原位检测技术，将能更加深入理解反应机理，促进催化剂的发展。

### 参考文献：

- [1] X. Zhang, A. Chen, L.T. Chen, Z. Zhou, Two-Dimensional Materials Bridging Experiments and Computations for Electro/Photocatalysis, *Adv. Energy Mater.* 2021, 11, 2003841.

### 个人简介：

周震，山东龙口人。郑州大学化工学院教育部“长江学者奖励计划”特聘教授；南开大学材料科学与工程学院教授、博士生导师。主持国家自然科学基金重点项目和重大研究计划培育项目等研究。在 *J. Am. Chem. Soc.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*和 *Adv. Mater.*等期刊上发表论文 300 余篇。论文被他人引用 22000 余次，h-index 为 88。2018-2020 年连续三年入选“科睿唯安”全球高被引科学家。2020 年入选英国皇家化学会会士(FRSC) 现为 *Journal of Materials Chemistry A*、*Materials Advances* 和 *Green Energy and Environment* 副主编、*JPCA/B/C*、《过程工程学报》、《电化学》和《电源技术》编委以及中国电子学会化学与物理电源技术分会第八届委员会委员。



## 报告题目：甲酸脱氢催化剂设计

报告人：蒋青

吉林大学 [jiangq@jlu.edu.cn](mailto:jiangq@jlu.edu.cn)

### 摘要：

依据国家 2030 年碳达峰和 2060 年碳中和的宏伟目标，采用绿氢发展氢能源汽车成为一项重要的国家需求。为实现这一目标，除了降低氢能源汽车的成本外，必须发展可工业化应用的制氢与储氢技术。本报告结合理论、模拟和实验等手段，介绍针对甲酸制氢工艺中的催化剂设计。结果表明，在提高催化剂性能的基础上，可实现室温下甲酸分解制氢，有望成为用于氢能源汽车的氢存储材料。

### 个人简介：

吉林大学材料科学与工程学院教授，教育部汽车材料重点实验室主任  
国家杰出青年基金获得者和长江学者奖励计划特聘教授。从事材料热/动力学研究。在国际学术期刊上发表 700 篇论文，被 SCI 引用 24000+次，h 指数 79。



## 报告题目：周期体系电子结构计算的量子算法

报告人：李震宇

中国科学技术大学 [zyli@ustc.edu.cn](mailto:zyli@ustc.edu.cn)

### 摘要：

变分量子特征值求解 (VQE) 算法是在近期含噪中等尺度量子器件上进行量子模拟的主流方法。但是该算法是针对分子等孤立化学体系来设计的，而对固体材料等的模拟一般需要引入周期性边界条件。我们发现直接将 VQE 算法应用到周期固体体系有很大的误差。其原因是周期体系的波函数为复数，这时直接用 VQE 算法变分得到的解只满足反厄密收缩薛定谔方程(ACSE)的实部，不满足其虚部。为了消除这一 ACSE 残留误差，我们提出了两种针对周期性体系的 VQE 改进方案。一种方案是通过 K 点到 Gamma 点的映射 (K2G)，在量子模拟过程中避免使用复波函数，从而将计算精度提高到与分子体系模拟相当的水平。另一种方案是将 VQE 方法与量子子空间展开 (QSE) 方法结合，通过引入响应空间来提高波函数和能量的精度。使用这种方法不仅能得到基态能量，还能获得激发态能量。

我们以一维氢原子链为例演示了上述两种方案的精度。分别采用自适应 VQE/ K2G 和 VQE/QSE 方法，在优化过程中不断加入新的激发算符来重构波函数，从而获得紧致且精确的波函数。变分优化通过经典的数值算法实现。最后，将周期性条件下一维氢原子链的基态和第一激发态势能面与直接用全组态相互作用准确求解薛定谔方程的结果进行了对比。结果表明改进的方法具有很高的精度，误差比直接应用 VQE 算法降低了 2-4 个量级。这一研究将量子模拟算法推广到固体周期性体系，为将来量子计算机在材料领域的应用奠定了基础。

### 参考文献：

- [1] Liu, J.; Wan, L.; Li, Z.; Yang, J. *J. Chem. Theory Comput.* **2020**, 16, 6904.
- [2] Liu, J.; Li, Z.; Yang, J. *J. Chem. Phys.* **2021**, doi: 10.1063/5.0054822
- [3] Fan, Y.; Liu, J.; Li, Z.; Yang, J., in preparation.

### 个人简介：

李震宇，男，中国科学技术大学教授、合肥微尺度物质科学国家研究中心研究员、博士生导师。1999 和 2004 年分别获得中国科学技术大学物理学学士和物理化学博士学位。2004-2007 年先后在美国马里兰大学和加州大学欧文分校从事博士后研究。2006 年入选全国百篇优秀博士学位论文作者，2008 年入选教育部新世纪优秀人才支持计划，2012 年获得国家自然科学基金委首届优秀青年科学基金项目资助，2015 年获中国化学会青年化学奖，2019 年获国家杰出青年基金资助。研究领域为理论与计算化学，发展和应用电子结构计算与分子模拟方法来研究材料物性和生长反应机理。在包括 *Phys. Rev. Lett.*、*JACS*、*Angew. Chem. Int. Ed.* 在内的国际学术期刊上发表论文 170 余篇，SCI 引用 7500 余次，H 因子为 48。





## 报告题目: Theoretical Design of Two-Dimensional Dirac

### Materials: *Models, Materials and Applications*

报告人: 赵明文

山东大学 [zmv@sdu.edu.cn](mailto:zmv@sdu.edu.cn)

#### 摘要:

Motivated by the great successes of graphene, two-dimensional (2D) Dirac cone materials that possess the linear energy-momentum dispersion relation in the electronic band structures are drawing increasing interest. A larger number of lattice models and the relevant materials have been proposed and some of them have been achieved in experiments. The relations between the lattice symmetry and the occurrence of Dirac cones, e.g. the minimum symmetry of 2D Dirac materials, are quite crucial for material design. Additionally, engineering the Dirac cones to achieving new physical phenomena beyond those in graphene will generate novel concepts for electronic devices.

In general, an ideal isotropic Dirac cone is protected by time reversal symmetry and inversion, so that its robustness against lattice distortion is not only of fundamental interest but also crucial to practical applications. Here we investigate systematically the robustness of Dirac cone in a Ruby lattice against four typical lattice distortions that break the inversion and/or mirror symmetry in the transition from Ruby to Star. Using a tight-binding (TB) approach, we show that the isotropic Dirac cones and their related topological features remain intact in the rotationally distorted lattices that preserve the inversion symmetry (*i*-Ruby lattice) or the in-plane mirror symmetry (*m*-Ruby lattice). On the other hand, the Dirac cones are gapped in the *a*- and *b*-Ruby lattices that break both these lattice symmetries or inversion. Furthermore, a rotational unitary matrix is identified to transform the original into the distorted lattice. The robust Dirac cones revealed in the non-mirror symmetric *i*-Ruby and non-centrosymmetrical *m*-Ruby lattices provide a general guidance for the design of 2D Dirac materials.

We demonstrated that a  $\square$ -conjugated 2D Cairo lattice of double-degenerate  $d_{\pi}$  and  $p_z$  orbitals can host multiple Dirac cones (type-I/III/II) in specific parameter regions, enabling the Lifshitz transition between these Dirac cones. Using first-principles calculations, we proposed a candidate material, *penta*-NiSb<sub>2</sub> monolayer, to realize these multiple Dirac cones. Unstrained *penta*-NiSb<sub>2</sub> monolayer has a type-III Dirac cone with the Fermi velocities ranging from zero to 10<sup>5</sup> m/s. The Lifshitz transition between the three types of Dirac cones can be induced by external biaxial strain. The coexistence of the three types of Dirac cones in the spatially inhomogeneous 2D Cairo lattice renders a promising fermionic analogue of Hawking radiation with the Hawking temperature of about 4.6 K.

#### 个人简介:

赵明文, 山东大学物理学院教授, 从事凝聚态理论和材料计算研究, 在低维材料的电子结构和缺陷效应等方面提出了多个理论模型, 得到实验验证, 并实现了器件应用。2014-2020年连续7年入选“中国高被引学者(物理天文类)”, 获教育部自然科学一等奖、二等奖(第一完成人)和山东省自然科学一等奖。



## 报告题目: Pseudo-Hermitian magnon polariton system

报告人: 夏钊

北京计算科学研究中心 [kexia@bnu.edu.cn](mailto:kexia@bnu.edu.cn)

### 摘要:

磁极化子是微波腔中由强相互作用的磁振子和光子组成的混合玻色子准粒子。本报告将提出了一种通过引入附加相位控场来驱动磁化的系统,在该系统中可以观察到模式同步,进一步的研究表明,我们引入了一个赝厄米哈密顿量,使得我们能够在磁振子-微波耦合系统的四维参数空间中得到一个三维的“例外曲面”。我们系统的赝厄米哈密顿量在腔自旋电子学中有最普遍的形式,其中 PT 和反 PT 对称是其中特例,该建议使空腔磁振子极化器成为一个丰富的平台,可以实现有趣的“例外点”现象,相应的实验建议也将在报告中提出。最后,也将介绍一些我们在自旋类脑计算方面的探索。

### 个人简介:

夏钊教授,南京大学物理系理学博士,2002年入选中国科学院百人计划,2008年 NSFC 杰出青年科学基金获得者。2009年调入北京师范大学大学任教,2011年任北京师范大学物理学系主任。2020年调入北京计算科学研究中心,任讲座教授,深圳京鲁计算科学应用研究院负责人。夏钊教授发展了基于非平衡格林函数以及相干势近似的电子结构计算方法,并深入研究了磁性多层膜中非共线体系自旋输运。夏钊教授在 SCI 收录的杂志上发表文章 120 余篇(含 Nature Nano. PRL 等 17 篇),在国际会议做邀请报告数十次。目前主要从事谐振腔自旋电子学理论及自旋-仿脑计算等方面的研究。



**报告题目: Determining and improving the kinetic stability of energy-rich molecules**

**报告人: 丁益宏**

温州大学 [yhdd@jlu.edu.cn](mailto:yhdd@jlu.edu.cn)

**摘要:**

A so-called high-energy and high-density material (HEDM) highly appeals for the good balance between the “detonation and stability” properties, though in most cases the two properties are quite contradictive. Nowadays, numerous attempts have been devoted to the search of low-lying structures. Yet, determining the intrinsic kinetic stability of a molecule against isomerization or decomposition continue to pose greater challenges than simply finding the lower-energy isomers. Here we describe our attempts to apply computation-aided strategies in tackling the kinetic stability of various kinds of energy-rich molecules with the eventual aim to find the “thermodynamically unstable but kinetically stable” species. Besides, suitable stabilization methods are considered to make kinetically less stable or unstable structures “more stable”. The molecular tuning on the kinetic stability of a molecule can provide a useful way for design and synthesis of novel HEDMs.

**个人简介:**

温州大学化学与材料工程学院教授，博士，博士生导师，温州大学高层次引进人才。曾担任吉林大学理论化学计算国家重点实验室副主任（2004-2014）。2001年任吉林大学理化所教授；2001年至2003年赴日本岐阜大学做JSPS研究员；2005年入选教育部新世纪优秀人才支持计划；2005年获吉林省杰出青年基金；2007年获吉林省青年科技奖；作为主要参加者，2003年和2007年两次获吉林省科学技术进步奖一等奖；2007年荣获第二批吉林省拔尖创新人才工程入选人选；2010年指导的两名学生分别获得全国优秀博士学位论文提名奖和吉林省优秀博士学位论文。并在JACS, Angew. Chem. Int. Ed., Astrophys. J., J. Mater. Chem. A., Chem. Commun., Chem-Eur.J., J. Phys. Chem. Lett. 等国内外学术刊物上发表200余篇研究论文。



主要研究方向：（1）环境和材料化学中重要小分子体系的结构与化学反应机理；（2）反传统化学体系的设计和组装；（3）纳米体系的结构与反应机理；（4）环境与能源小分子的高效转化利用。



## 报告题目：含硼多面体核-壳团簇：可能的储氢材料

报告人：刘英

河北师范大学 [yliu@hebtu.edu.cn](mailto:yliu@hebtu.edu.cn)

### 摘要：

1. 简要回顾多面体团簇的研究进展；2. 介绍系列稳定的类五角化十二面体分子  $B_{12}@M_{20}A_{12}$  (M 代表金属元素，A 代表 III-V 族元素) 的结构设计和储氢特性；3. 介绍以  $B_{12}$  为核的  $B_{12}@M_n$  (M 代表金属元素) 核壳团簇的结构稳定性和储氢特性。

### 个人简介：

刘英，1988 年河北师范大学物理学专业本科毕业，2003 年在北京科技大学获得博士学位，导师陈难先院士。2002 年 11 月任河北师范大学教授；2011 年 12 月至 2016 年 8 月任河北师范大学物理学院院长；2019 年 5 月起任河北师范大学副校长。



主要研究领域为低维系统结构和特性的模拟与设计。在 Nano Lett、Nanoscale、Small、Phys Rev B、PCCP、ChemPhysChem、J Chem Phys、J Phys Chem A/C、The Astrophysical Journal 等学术刊物发表论文 60 余篇，研究成果多次被 NPG Asia Materials、New Scientist、Physics Today、Sciences et Avenir、Chemistry World 等科技媒体进行亮点报道，部分研究成果被 SCIENCE CHINA-Physics, Mechanics & Astronomy、J Phys Chem C、PCCP、Chem Phys Chem 等期刊选为封面论文发表。先后主持了 5 项国家自然科学基金项目，参加 3 项国家重点基础研究发展规划 (973) 项目的研究工作。

**报告题目: Towards computational design of chemical reactions  
with reaction phase diagram**

**报告人: 肖建平**

中国科学院大连化学物理研究所 *xiao@dicp.ac.cn*

**摘要:**

As the advancement of general concepts in heterogeneous catalysis, theoretical study of chemical reactions based on DFT calculations has become more and more feasible, which provides a guideline for the rational design of novel catalysts towards higher reaction activity and specific selectivity. Here, we present an innovate scheme, namely reaction phase diagram (RPD), which can offer not only an in-depth understanding of reaction mechanisms, but also the prediction of catalytic activity and selectivity trend over a collection of catalysts. The RPD analysis was successfully applied to understand the activity variation of CO<sub>2</sub> electroreduction to CO and formic acid, as well as thermochemical hydrogenation and dehydrogenation. Meanwhile, the RPD analysis also exhibits a success of studying the product selectivity in syngas conversion to methane, ethanol, and methanol with complicated reaction pathways. At the end, we will present a successful case of catalyst rational design with a target of NO selective electroreduction to ammonia.

**个人简介:**

肖建平, 中国科学院大连化学物理研究所研究员, 博士生导师, 理论催化创新特区研究组组长。被评为“张大煜青年学者”, 入选辽宁“英才计划”青年拔尖人才。在 *Science*, *Nat. Energy*, *Nat. Commun.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Phys. Rev. Lett.*, *Chem*, *Adv. Mater.* 等国际知名刊物上发表 SCI 论文 70 多篇。目前主要研究领域为围绕化学反应机理、基于大数据的机器学习和微观动力学模拟来对固体催化剂的设计提供指导意见。



## 报告题目：金属团簇及其反应性的实验与理论研究

报告人：骆智训

中国科学院化学研究所 [zxluo@iccas.ac.cn](mailto:zxluo@iccas.ac.cn)

### 摘要：

团簇研究系统涉及到许多的物质运动过程和现象，如防腐、催化等化学化工过程，已成为物理、化学和材料等多学科的交叉前沿。裸金属团簇的反应性研究对深入理解宏观块体金属在尺寸缩小时的整体性质和金属表面的活性位点/惰性结构单元具有重要的科学意义<sup>[1]</sup>。通过自主研制的团簇实验装置，我们发现过渡金属团簇中存在着一些具有非凡稳定性/反应性的超原子团簇新物种<sup>[2-8]</sup>，它们有着特殊的几何结构以及类比于原子的电子结构<sup>[9]</sup>，结合理论研究，揭示了这些超原子团簇的稳定性机制和新颖的反应机理，以原子精度去认识体相材料的基本物理性质和化学行为，为精准制备具有金属团簇基因的源头/功能新材料提供了实验和理论依据。本次报告将介绍课题组基于金属团簇精准化学反应的一些最新进展，以期构建具有丰富的物理化学性能的团簇新物种应用于催化，也将从“超原子化学”到“团簇材料基因”的新视角<sup>[10, 11]</sup>，介绍交流金属团簇结构化学及其与光化学、能量转化等有关科学问题的关联。

### 参考文献：

- [1] Z. Luo, A.W. Castleman, S.N. Khanna, *Chem. Rev.*, 116 (2016) 14456-14492.
- [2] Y. Jia, X. Yu, H. Zhang, L. Cheng, Z. Luo, *J. Phys. Chem.Lett.*, 12 (2021) 5115-5122.
- [3] H. Zhang, M. Zhang, Y. Jia, L. Geng, B. Yin, S. Li, Z. Luo, F. Pan, *J. Phys. Chem.Lett.*, 12 (2021) 1593-1600.
- [4] L. Geng, B. Yin, H. Zhang, Z.-D. Sun, Z. Luo, *Nano Research*, (2021).
- [5] L. Geng, M. Weng, C.-Q. Xu, H. Zhang, C. Cui, H. Wu, X. Chen, M. Hu, H. Lin, Z.-D. Sun, X. Wang, H.-S. Hu, J. Li, J. Zheng, Z. Luo, F. Pan, J. Yao, *Natl. Sci. Rev.*, 8 (2021).
- [6] B. Yin, Q. Du, L. Geng, H. Zhang, Z. Luo, S. Zhou, J. Zhao, *J. Phys. Chem.Lett.*, 11 (2020) 5807-5814.
- [7] C. Cui, Y. Jia, H. Zhang, L. Geng, Z. Luo, *J. Phys. Chem.Lett.*, 11 (2020) 8222-8230.
- [8] H. Zhang, H. Wu, Y. Jia, B. Yin, L. Geng, Z. Luo, K. Hansen, *Comms. Chem*, 3 (2020) 148.
- [9] Z. Luo, A.W. Castleman, *Acc. Chem. Res.*, 47 (2014) 2931-2940.
- [10] B. Yin, Z. Luo, *Coord. Chem. Rev.*, 429 (2021) 213643.
- [11] Y. Jia, Z. Luo, *Coord. Chem. Rev.*, 400 (2019) 213053.

### 个人简介：

骆智训，研究员，博士生导师，中国科学院化学研究所分子动态稳态结构国家重点实验室。聚焦于金属团簇稳定性与反应性研究，自主研发了多套创新性的团簇制备、气相反应与质谱光谱检测综合仪器系统，围绕金属表面化学中有关腐蚀与防腐、金属团簇用于催化和新材料的关键科学问题，从纯金属团簇的高效制备出发，深入开展了团簇结构稳定性、气相反应、光学/催化性质等方面的研究，提出狭义和广义超原子的概念，把卤素/氧桥保护的气相金属团簇与湿法合成的配体保护金属团簇相关联；首次完整提出“超原子团簇化学”研究范畴，致力于构筑三维元素周期表及在此基础上的超原子团簇基因新材料；探究了三原子金属团簇催化作用，并开发了有机金属簇合物的气相合成与分子束发光研究新方法。第一作者/通讯作者发表论文 130 余篇，专著《*Metal Clusters and Their Reactivity*》在 Springer 出版。



## 报告题目：优异电催化材料的高通量计算与筛选

报告人：王璐

苏州大学 [lwang22@suda.edu.cn](mailto:lwang22@suda.edu.cn)

### 摘要：

我们基于密度泛函理论（DFT）的高通量筛选方法，成功地针对合金纳米团簇作为电催化析氢（HER）催化剂进行了高通量计算和筛选。我们提出的高通量筛选方法从结构稳定性和电化学活性两个方面对铜基合金团簇进行了评估，探讨了掺杂金属比例对催化活性的影响机制，进一步以团簇表面电荷为特征建立了神经网络模型，实现了对团簇表面氢原子吸附自由能的成功预测，提出了兼具高稳定性和高活性特点的铜镍合金团簇在电催化反应中的潜在应用。另外，进一步基于 Sr-Ru-Ir 三元氧化物的结构稳定性和电催化析氧（OER）活性进行了高通量计算，在 2201 种不同比例的三元金属氧化物中筛选得到了十种不同金属比例的最稳定结构，在此结构基础上探索了不同金属比例对材料电催化 OER 性能的影响和调控，最终获得兼具稳定性和活性的 Sr-Ru-Ir 三元金属氧化物，并得到了实验验证。

### 个人简介：

王璐，苏州大学教授，近年来围绕纳米材料的稳定结构、性质和潜在应用开展了一系列创新性、系统性、深入性的研究，设计了多种新型纳米材料和催化材料。目前在 *J. Am. Chem. Soc.*, *Adv. Mater.*, *Nano Lett.* 等杂志发表学术论文 60 余篇，他引次数高于 2800 次，H 因子 30。主持多个国家级项目，获得教育部高等学校科学研究自然科学奖二等奖。



报告题目：二维材料设计及电催化机理研究

报告人：杨利明

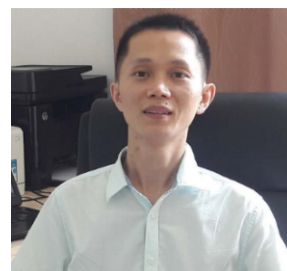
华中科技大学 [Lmyang@hust.edu.cn](mailto:Lmyang@hust.edu.cn)

摘要：

Two-dimensional (2D) materials is a kind of rising materials with unique atomic structure and exotic physical and chemical properties. With the discovery of graphene, and the development of various experimental synthesis methods and characterization techniques, novel 2D materials continue to emerge. This lecture will introduce some new two-dimensional materials that we have recently designed and predicted, and on this basis, we have expanded to the application of electrocatalysis. Aiming at the design of efficient electrocatalyst materials and the exploration of micro-reaction mechanism, we have developed a hierarchical high-throughput screening method, which can not only greatly reduce the amount of calculation, but also does not lose important results.

个人简介：

Li-Ming Yang completed his PhD studies at Jilin University in 2008, followed by several postdoctoral training and visiting experience at different institutes (include University of Oslo, Donostia International Physics Center, University of Georgia, Massachusetts Institute of Technology, University of Bremen, Hanse-Wissenschafts-Kolleg(HWK), Institute for Advanced Study, Jacobs University Bremen, Humboldt-Universität zu Berlin). Then he joined Huazhong University of Science and Technology in the early of 2016 as a Professor of Chemistry. His research and teaching focus on the areas of electrocatalysis (NRR, CRR, OER, ORR, HER) and two-dimensional materials via data-driven high-throughput computational screening and machine learning algorithm.



## 报告题目：中性团簇红外光谱研究

报告人：江凌

中国科学院大连化学物理研究所 [ljiang@dicp.ac.cn](mailto:ljiang@dicp.ac.cn)

### 摘要：

团簇是介于原子分子与宏观物质之间的多核聚集体，研究团簇结构与性能随尺寸变化的规律，对深刻认识和理解物质从分子态到凝聚态的渐变过程具有重大意义。我们发展了基于大连极紫外自由电子激光的中性团簇红外光谱实验方法，实现了气相质量选择中性团簇的红外光谱学和反应特性研究。利用该方法，发现了最小水滴立体结构是由 5 个水分子组成，打破了前人对最小水滴是由 6 个水分子的认知。在本报告中，首先介绍这个实验方法，然后举例说明它们在水分子和氨分子等重要大气团簇结构演化机制研究中的应用。



### 参考文献：

- [1] G. Li, L. Jiang\*, et al., *Rev. Sci. Instrum.*, 2020, 91, 034103.
- [2] B. Zhang, J. Li\*, D. H. Zhang\*, X. M. Yang\*, L. Jiang\*, et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, 2020, 11, 851.
- [3] B. Zhang, L. Jiang\*, J. Li\*, X. M. Yang\*, et al., *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 2020, 117, 15423.
- [4] G. Li, J. Li\*, X. M. Yang\*, L. Jiang\*, et al., *Nat. Commun.*, 2020, 11, 5449.
- [5] C. Wang, M. F. Zhou\*, L. Jiang\*, et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, 2021, 12, 1012.

### 个人简介：

江凌，研究员，博士生导师，现任中国科学院大连化物所团簇光谱与动力学研究组组长。2007 年于日本神户大学博士毕业，2007-2009 年在日本产业技术综合研究所做日本学术振兴会博士后，2009-2011 年在德国弗里茨哈伯研究所做洪堡学者。2011 年被引进中科院大连化学物理研究所，2012 年获得中国科学院“百人计划”择优支持。先后主持国家自然科学基金重点项目、国家重大科研仪器设备研制专项子课题、大连光源专项基金等。



主要从事大气团簇结构演化机制和纳米团簇构效关系研究，专注研发团簇红外光谱相关技术。已在 *Science*、*PNAS*、*Nature Commun.*、*J. Am. Chem. Soc.* 和 *Angew. Chem.* 等期刊发表论文 120 余篇。



## 报告题目：应力对材料体系结构和析氢催化性能的调控

报告人：陈巍

福建师范大学 [chenwei@fjnu.edu.cn](mailto:chenwei@fjnu.edu.cn)

**摘要：**当今世界正面临着严峻的能源和环境危机。开发一种绿色的可替代能源（如氢能）已成为亟待解决的重大问题。水电解制氢是人们最关注的一种制氢方案，高效催化剂是该方法实施的关键。目前，非贵金属电催化剂已受到广泛关注，金属硫化物、硒化物、碳化物、氮化物以及磷化物等均能表现出一定的析氢/析氧（HER/OER）催化活性。尽管，实验研究已取得了一定进展，但从原子尺度探索催化剂内部微观结构，揭示催化机理和微观反应过程的理论工作还相当匮乏，这将在很大程度上制约此类催化剂的研究进程。鉴于此，我们课题组针对新型 HER/OER 催化剂设计及催化机理展开了系统的理论研究，从原子水平探索了复杂电荷转移过程、内部结构张力、空间位阻、缺陷形成、表面掺杂以及外加应力等对相关催化剂性能的影响<sup>[1-8]</sup>。其中，我们的研究发现应力可以作为有效的策略，能通过同时优化材料的电学性质及表面催化活性两个重要方面去有效调控体系的析氢催化性能；相关成果能为实验合成相关廉价高效的催化剂提供全新思路，推进氢能研发。

### 参考文献：

- [1] Jian J, Chen W, Yu GT, Yuan HM, et al. *J. Mater. Chem. A*, 2021, 9, 7586
- [2] Liu JW, Yu GT, Chen W, et al. *2D Mater.*, 2020, 7, 015015.
- [3] Feng TL, Yu GT, Chen W, Yang B, et al. *J. Mater. Chem. A*, 2020, 8, 9638.
- [4] Qian GF, Yu GT, Yin SB, Chen W, Mu SC, et al. *J. Mater. Chem. A*, 2020, 8, 14545.
- [5] Zhang CH, Yu GT, Chen W, et al. *Appl. Surf. Sci.*, 2019, 481, 272.
- [6] Yang L, Yu GT, Chen W, Zou XX, et al. *Nat. Commun.*, 2018, 9, 5236.
- [7] Jing SY, Yin SB, Chen W, Shen PK, et al. *Adv. Mater.*, 2018, 1705979.
- [8] Chen YL, Yu GT, Chen W, Zhu PW, Asefa T, Zou XX, et al. *J. Am. Chem. Soc.*, 2017, 139, 12370.

### 个人简介：

陈巍，博士，福建师范大学教授，主要从事新材料的结构设计和电学、磁学、光学以及催化等性能方面的理论研究工作。截至目前，已取得了系列创新性研究成果，在国际知名学术期刊上共发表 SCI 论文 100 余篇，基本都发表在影响因子 4.0 以上的学术期刊上（累计他引近 5000 余次，h-index=30），其中以通讯/一作在影响因子大于 10.0 的行业内顶级杂志上发表论文 12 篇（包括 *Nat. Commun.* 1 篇、*J. Am. Chem. Soc.* 5 篇（2 篇为封面文章和亮点文章）、*Angew. Chem. Int. Ed.* 2 篇、*Adv. Mater.* 1 篇和 *J. Mater. Chem. A* 3 篇），7 篇已成为 SCI 高被引论文，2 篇为“热点论文”。目前，作为负责人已主持包括国家自然科学基金、教育部基金，吉林省教育厅和科技厅以及福建省科技厅等项目共 13 项；并获得“吉林大学国家杰出青年科学基金后备人选培育计划”支持。2020 年获“闽江学者”计划支持，作为高层次人次引进到福建师范大学化学与材料学院工作。



## 报告题目：双齿配体对过渡金属氢氧化物析氧性能调控的 理论研究

报告人：张妍宁

电子科技大学 [yanningz@uestc.edu.cn](mailto:yanningz@uestc.edu.cn)

### 摘要：

配体不仅可以用来稳定配合物和保护其他官能团，还能影响配合物中心金属的物理化学性质。通过配体修饰来调控材料的性能一直受到研究者的广泛关注。近来，我们与实验组紧密合作，以呈电中性的 2,2'-联吡啶（简称 bpy）、邻二氮菲（简称 phen）等双齿配体和常见 3d 过渡金属氢氧化物构成的配合物为研究对象，对其电化学催化机理进行了研究。实验上获得的镍膺配合物  $(bpy)_zNiO_xH_y$  (bpy = 2, 2'-联吡啶) 在强碱性介质中表现出较高的电解水析氧活性，且有 200 小时以上的长期稳定性，优于相同镍质量负载的铁掺杂镍(氧)氢氧化物。理论计算分析进一步表明，共轭的金属-配体结构可以诱导更加高效的电子转移，从而改变 Ni 氧化物表面的电子结构，显著提升其电催化析氧性能。另外配体亦对材料磁性有着明显的调控作用。以  $(phen)_xCoO(OH)_y$  配合物为例，第一性原理计算研究证实了体系中的 phen 配体可以改变单个金属钴位点的晶体场和自旋态，同时使其存在价态交换状态，进而影响体系的电催化析氧性质，这与实验结果相一致。相关研究结果表明配体对调控过渡金属氧化物的电子性质、磁性和物化性能等有不可忽视的作用，也为新的实验设计提供了理论指导。

### 个人简介：

张妍宁，2008 年获山东大学博士学位，之后进入美国加州大学尔湾分校博士后工作站，2013 年 11 月加入中物院成都科学技术发展中心，2016 年 12 月任电子科技大学教授。主要采用多尺度先进理论模拟与计算方法，对能源转换与存储材料、磁性材料、低维材料等各类功能材料的结构和物性进行研究和设计。目前已在包括 JACS、Adv.



Mater. 等国际期刊上发表学术论文近百篇，主持和参与国家自然科学基金等、JWKJW 基础加强重点项目等，获选国家青年人才，四川省高层次人才计划和成都市创新人才等。



## 报告题目：二维材料预测及其在能源和催化的应用

报告人：何朝政

西安工业大学 94631595@qq.com

### 摘要：

采用 Calypso 程序预测了几种新型的二维材料，并对其稳定性，电子结构进行分析，并指出其可能的潜在应用。BC<sub>3</sub>N<sub>2</sub> 具有和石墨烯类似的六元环结构，具有金属性。分子动力学结果表明其在 2400 K 仍然有很好的稳定性。分析了热导率与 CO<sub>2</sub> 分子吸附性能关系。MgSiP<sub>2</sub> 和 PS<sub>2</sub> 在 Na 离子电池有潜在的应用，理论容量分别为 1406 和 1692 mAh/g，迁移势垒分别为 0.16 和 0.17 eV。

### 参考文献：

- [1] *Chinese Chemical Letters* 32 (2021) 1081–1085
- [2] *Chinese Chemical Letters* 31 (2020) 2325–2329
- [3] *Chinese Chemical Letters* 32 (2021) 1089–1094
- [4] *Chinese Chemical Letters* <https://doi.org/10.1016/j.cclet.2021.02.046>.

### 个人简介：

何朝政，校特聘教授。陕西省青年千人。山西师范大学、河南理工大学兼职硕导。Chin. Chem. Lett. 青年编委，客座编辑。Adv. Power Mater. 特聘编委。

研究方向为凝聚态理论与计算材料物理、材料设计与模拟，一直致力于发展与应用第一性原理计算方法与模型研究催化、电池材料结构调控及其微观机制、新型二维材料的预测、新物理效应及其性质调控等研究。现已在著名国际刊物 Appl. Catal. B、J. Catal.、J. Mater. Chem. A/C、Chem. Engin. J、Carbon、Chin. Chem. Lett.、J. Phys. Chem. C 等国际著名杂志发表 SCI 论文 80 余篇。个人 H 因子 25。主持国家自然科学基金 2 项。荣获河南省科技进步三等奖一项。



## 第十三届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会 I009

# 报告题目: CNMGE 高通量材料计算平台与材料大数据应用管理系统

报告人: 李庚

国家超级计算天津中心 [ligeng@nscj-tj.cn](mailto:ligeng@nscj-tj.cn)

### 摘要:

高通量材料计算平台是高效材料研发与高性能计算的有机结合,是材料基因工程中的重要基础环节,是国际新材料研究领域的共性前沿创新载体,已经有国际团队开展高通量材料计算平台的研发和探索。这些平台突出的特点是依托超级计算系统结合当前高效材料研发的需求进行研发构建,例如基于 NERSC 构建的 Materials Project, 基于 Cray 构建的 Automatic-Flow, 以及依托 Barcelona Supercomputing Centre 构建的 NOMAD 等。我们依托国家超级计算中心和我国自主研发的千万亿次(P级)和正在研发中的百亿亿次(E级)超级计算平台,构建可实现高通量材料计算需要的自动流程、高并发、多尺度等突出特点和能力的“中国材料基因工程高通量计算平台(CNMGE)”。

平台依托国家超级计算天津中心的超级计算平台和云服务平台,融合了高通量计算、大数据管理、远程可视化、机器学习等前沿计算机技术,开发了高通量自动流程的材料计算系统和数据应用管理系统,提供了从材料建模->软件安装与使用->参数配置->模拟计算->结果查看与可视化一整套自动流程模拟计算服务。实现了高并发、跨尺度、自动流程的高通量材料计算模拟和材料计算数据管理。平台目前实现了 11 项功能:快捷的资源管理和任务管理系统,一键式部署的软件仓库,一键式登陆超算系统的 Shell 界面,交互式高通量计算,高效的超算数据管理网盘,可查询的海量晶体结构数据库和势函数数据库,晶体性质智能快速预测系统,国产自主软件社区,用户共享数据库,数据可视化模块。集成了 50 款常用材料模拟计算软件,11 款材料结构可视化软件,构建了 11 个材料模拟计算的业务流,支持 1000 个高通量作业并发。开发了支持材料结构数据可视化工具,包括基于 WebGL 的可视化组件和基于 VNC 远程 GPU 加速可视化方法,支持原子数目大于 2000 万个的分子结构可视化。支持国内自主软件开发,打造了“国家级”材料国产自主软件社区,平台目前集成了北京航空航天大学孙志梅教授团队开发的 ALKEMIE 集成计算平台、中国工程物理研究院化工材料研究所开发的含能材料高通量筛选平台 EM-Studio、吉林大学李乙教授团队开发的分子筛软件 FraGen、北京理工大学周金健教授团队开发的热电软件 Perturbo 等。

在平台建设过程中,国家超级计算天津中心形成了对材料研发的信息化支撑体系,将长期致力于为科研院校、企业和个人提供安全快捷的超级计算、大数据存储管理和可视化的需求解决方案。CNMGE 平台是一个国家级的开源、开放的平台,设置了机时奖励机制和青年科学家免费机时开放基金,鼓励材料模拟计算,实现材料研发用户平台软件、数据、成果的快速共享和服务,同时注重知识产权保护。

### 个人简介:

李庚,男,理学博士。2018 年毕业于清华大学物理系,2017 年前往美国劳伦斯伯克利国家实验室交流访问。现为国家超级计算天津中心高性能计算高级工程师。目前已经发表 SCI 论文 16 篇,授权软著 4 项,申请专利 2 项,先后参与国家重点研发计划项目 4 项。主要研究方向第五主族纳米材料的电子,磁和热输运性质,二维硼平面结构的超导电性,微观晶体结构的高通量计算设计,第一性原理计算软件在超算系统上的并行计算。目前主要负责中国材料基因工程高通量计算平台(<http://mathtc.nscj-tj.cn/>)的技术设计、研发和运营维护。



## 报告题目：反应环境中的纳米材料原位可塑性

报告人：朱倍恩

中国科学院上海高等研究院 [zhubeien@zjlab.org.cn](mailto:zhubeien@zjlab.org.cn)

**摘要：**近二十年的实验研究显示纳米固体晶体的形貌、尺寸、表面组分、界面结构等在反应环境中都会发生动态的变化。这些变化的揭示对学界重新认识表面催化机理起到了重要的作用同时也对传统的催化计算研究以及模拟方法提出了挑战。如何在纳米催化计算中将反应中催化剂表面结构实时动态的变化考虑进去成为了困扰大家已久的问题。近些年中，我们发展了原创的多尺度结构重构模型首次实现了反应环境下纳米材料形貌演化的定量预测，并在之后的系列工作中充分验证了该模型的有效性和可靠性<sup>[1-2]</sup>。以此为基础，我们与实验合作完成了一些重要工作<sup>[3-5]</sup>。最近，我们进一步发展了反应环境中表面催化反应的原位计算方法将催化剂表面结构变化与催化反应过程统合起来实现实时模拟。这些工作的展开使我们相信未来利用反应环境实时原位调控催化剂结构乃至其性能是可行的。

### 参考文献：

- [1] Zhu, Beien; Xu, Zhen; Wang, Chunlei; Gao, Yi\*; Shape Evolution of Metal Nanoparticles in Water Vapor Environment , *Nano Letters*, 2016, 16(4): 2628-2632.
- [2] Zhu, Beien#; Meng, Jun#; Yuan, Wentao#; Zhang, Xun; Yang, Hangsheng; Wang, Yong\*; Gao, Yi\*; Reshaping of Metal Nanoparticles Under Reaction Conditions , *Angewandte Chemie International Edition*, 2020, 59(6): 2171-2180.
- [3] Yuan, Wentao#; Zhu, Beien#; Fang, Ke#; Li, Xiao-Yan; Hansen, Thomas W.\*; Ou, Yang; Yang, Hangsheng; Wagner, Jakob B.\*; Gao, Yi\*; Wang, Yong\*; Zhang, Ze; In situ manipulation of the active Au-TiO<sub>2</sub> interface with atomic precision during CO oxidation , *Science*, 2021, 371(6528): 0-abe3558.
- [4] Yuan, Wentao#; Zhu, Beien#; Li, Xiao-Yan#; Hansen, Thomas W.; Ou, Yang; Fang, Ke; Yang, Hangsheng; Zhang, Ze\*; Wagner, Jakob B.\*; Gao, Yi\*; Wang, Yong\*; Visualizing H<sub>2</sub>O molecules reacting at TiO<sub>2</sub> active sites with transmission electron microscopy , *Science*, 2020, 367(6476): 428-430.
- [5] Zhang, Xiaoben#; Han, Shaobo#; Zhu, Beien#; Zhang, Guanghui#; Li, Xiao-Yan; Gao, Yi\*; Wu, Zhaoxuan; Yang, Bing\*; Liu, Yuefeng; Baaziz, Walid; Ersen, Ovidiu; Gu, Meng\*; Miller, Jeffrey T.; Liu, Wei\*; Reversible loss of core-shell structure for Ni-Au bimetallic nanoparticles during CO<sub>2</sub> hydrogenation, *Nature Catalysis*, 2020, 3(4): 411-417.

### 个人简介：

中国科学院上海高等研究院副研究员，硕士生导师，2018年入选中国科学院青年创新促进会。主要研究领域为复杂环境下固液、固气表界面物理、化学现象的理论计算模拟，致力于发展适用于真实反应条件下的表面催化原创理论与模型。独创了结合密度泛函理论（DFT）与传统热力学吸附模型的DFT-等温吸附计算方法，基于此方法发展了原创的多尺度结构重构模型，并在与实验的广泛合作中验证并发挥了这些新理论模型的效用。近五年来以（共同）第一或共同通讯作者在《科学》（2篇）、《自然-催化》、《自然-通讯》、《德国应用化学》（3篇）、《纳米快报》（2篇）等国际知名期刊上发表多篇论文。



## 报告题目：低维材料的活性和光生载流子动力学性质的 优化调控

报告人：周思

大连理工大学 [sizhou@dlut.edu.cn](mailto:sizhou@dlut.edu.cn)

### 摘要：

光催化是实现可持续性的清洁能源生产和储存的重要手段之一。然而，开发高效的光催化剂仍具有很大的挑战性，需要半导体材料同时满足一些严格的条件，例如具有较强的可见光吸收、能够有效抑制电子-空穴复合、对特定的反应提供活性中心等，因此，亟需从原子尺度上探索影响半导体光催化行为的关键因素、及其与电子能带结构的关联。对此，我们采用第一性原理计算和非绝热分子动力学模拟<sup>1</sup>对光催化过程进行较为全面的表征，包括光生载流子随时间演化的动力学行为和反应过程。我们考虑了三种低维体系，包括层状卤氧化铋的异质结构 (BiOCl/BiOBr)<sup>2</sup> 和缺陷磷烯用于氮还原反应<sup>3</sup>，以及 MgO 团簇修饰的 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 用于全分解水反应<sup>4</sup>，系统阐明了元素掺杂、缺陷和异质结对光吸收、电子-空穴分离和电荷转移过程、光生载流子寿命和氧化/还原能力、以及催化活性/选择性的影响，归纳了优化调控低维材料的光催化性能的普适性方法。

### 参考文献：

- [1] Zheng, Q.; Chu W.; Zhao C.; Zhang L.; Guo, H.; Wang Y.; Jiang X.; Zhao J. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2019**, *9*: e1411.
- [2] Zhao, Y.; Zhou, S.\*; Zhao, J.; Du, Y.; Dou, S. X. *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, *11*: 9304.
- [3] Pei, W.; Zhou, S.\*; Zhao, J.; Du, Y.; Dou, S. X. *J. Mater. Chem. A* **2020**, *8*: 20570.
- [4] Liu, N.; Zhou, S.\*; Zhao, J. *Mater. Today Phys.* **2021**, *16*: 100312.

### 个人简介：

周思，大连理工大学研究员，2014年博士毕业于美国佐治亚理工大学，长期从事低维凝聚态物理及相关交叉学科的理论研究，作为第一或通讯作者在 *Chem. Rev.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Nano Lett.*, *ACS Nano*, *Mater. Today Phys.*, *Phys. Rev. Mater.*, *J. Phys. Chem. Lett.*, *Appl. Phys. Lett.*, *Chin Phys. Lett. (Express Letter)* 等高水平期刊发表 SCI 论文 76 篇，SCI 累计引用 3900 余次，H 因子 29 (ResearchID: P-6339-2016)，入选人社部高层次人才留学回国人才，担任《原子与分子物理学报》编委、《物理化学学报》青年编委、《Materials Today Sustainability》青年编委。





## 报告题目：基于固态储能应用的低维材料理论设计与性质研究

报告人：王维华

南开大学 [whwangnk@nankai.edu.cn](mailto:whwangnk@nankai.edu.cn)

### 摘要：

近年来，二维材料由于比表面积大、无悬挂键、物理化学性能优异、力学稳定性高等优势在全固态储能领域展现出巨大的应用潜力。如何设计开发具有高性能的二维电极材料及具有快速离子传输性能的二维超薄固态电解质对下一代固态储能器件的发展尤为重要。

我们采用基于密度泛函理论的第一性原理计算研究了一系列二维材料在电极和电解质方面的储能性质及储能机理，主要结果如下：（1）在电极方面，针对半导体相 MoS<sub>2</sub> 电极材料的载流子浓度 ( $\sim 10^{10} e/cm^2$ ) 较低问题，我们通过引入二维绝缘缓冲层 YBr<sub>3</sub>，同时结合离子掺杂，在不引入带隙态的情况下，实现了对 MoS<sub>2</sub> 有效的 *n* 型或 *p* 型掺杂，其载流子浓度得到明显提高；针对具有较小的裂解能及动力学稳定性的新型二维金属材料 Ta<sub>2</sub>CS<sub>2</sub>，其较低的离子扩散势垒、合适的开路电压以及较高的理论容量，表明单层 Ta<sub>2</sub>CS<sub>2</sub> 有望用作高效储能电极材料；（2）在电解质方面，发现有机冠醚分子是一种潜在的具有超快 Li<sup>+</sup> 传输的固态电解质材料，Li<sup>+</sup> 在单个冠醚分子 CE5 和两个 CE5 分子间的扩散势垒低至 0.29 eV 和 0.16 eV；此外，我们提出并验证具有天然原子孔和宽带隙特征的新型二维材料 MX<sub>3</sub> 作为超薄固态电解质，同样具有超快的离子传输性能。

上述研究工作为深入理解低维材料的电子态性质和储能机制提供理论基础，也为进一步的理论设计和开发基于低维材料的全固态储能器件提供有力参考。上述工作得到国家自然科学基金（11874223, 51871121）和国家重点研发计划（2016YFB0901600）的支持。

### 参考文献：

- [1] M. Wu, P. Liu, L. Li, H. Dong, Y. Chen, H. Chen, W. Wang, H. Liu, F. Lu\*, W. H. Wang\* and K. Cho\*, *Nanoscale*, 12, 7188-7195 (2020). (Selected as "Editor's Choice")
- [2] M. Wu, B. Xin, W. Yang, B. Li, H. Dong, Y. Cheng, W. Wang, F. Lu\*, W. H. Wang\*, H. Liu\*, *ACS Appl. Energy Mater.*, 3 (11), 10695-10701 (2020).
- [3] M. Wu, P. Liu, B. Xin, L. Li, H. Dong, Y. Cheng, W. Wang, F. Lu, K. Cho, W. H. Wang\*, H. Liu\*, *Appl. Phys. Lett.*, 114 (17), 171601 (2019). (Selected as "Editor's Pick")
- [4] J. Liang, K. Xu, M. Wu, B. M. Hunt, W. H. Wang, K. Cho, S. K. Fullerton-Shirey, *Nano Lett.*, 19 (12), 8911-8919 (2019).
- [5] W. H. Wang\*, C. Gong, W. Wang, F. Kong, H. Kim, S. K. Fullerton-Shirey, A. Seabaugh, K. Cho\*, *Solid State Ionics*, 301, 176-181 (2017).
- [6] P. Liu, F. Lu\*, M. Wu, X. Luo, Y. Cheng, X. W. Wang, W. Wang, W. H. Wang, H. Liu, K. Cho, *J. Mater. Chem. C*, 5 (35), 9066 (2017)

### 个人简介：

王维华，南开大学电子信息与光学工程学院电子科学与工程系教授，博士生导师；2007年7月毕业于中国科学院固体物理研究所，获凝聚态物理专业博士学位；自2007年7月起，在南开大学工作。2008年4-6月，在新加坡南洋理工大学做访问学者；2013年4月-2014年6月，在美国德州大学达拉斯分校做访问研究员。研究方向为面向快速电子器件和储能应用的新型功能材料设计与性能调控，在材料、物理、化学等领域重要学术期刊上发表SCI检索学术论文70余篇。



**报告题目： Reversible cycling of graphite electrode in propylene carbonate electrolyte enabled by ethyl isothiocyanate**

**报告人： 郭丽敏**

中科院长春应化所 [lmguo@ciac.ac.cn](mailto:lmguo@ciac.ac.cn)

**摘要：**

As one of the greatest inventions in the history of electrochemistry, the lithium-ion battery (LIB) has radically transformed human being's daily life by powering portable electronics and electric vehicles. When looking back on the long and arduous effort devoted to the development of the LIB technology, it is found that the birth of LIB could be even earlier if reversible cycling of the graphite electrode had been realized in propylene carbonate (PC) electrolyte, one of the few dominating electrolytes extensively used in nonaqueous electrochemistry long before the concept of LIB. In this work, a functional electrolyte additive, i.e., ethyl isothiocyanate (EITC), has been identified to enable the reversible  $\text{Li}^+$  ion intercalation/de-intercalation into/out of the graphite electrode in PC electrolyte by forming a high-quality solid electrolyte interphase (SEI) on the graphite electrode. A wide range of advanced *in-situ* and *ex-situ* spectroscopic characterization techniques coupled with theoretical calculations have been employed to understand the SEI formation mechanism. The results reported here rejuvenate the promise of PC as the primary electrolyte solvent for LIB by artificially rectifying the interfacial electrochemical processes.

**个人简介：**

Limin Guo obtained her M.Sc. and Ph.D. degrees from Changchun Institute of Applied Chemistry in 2004 and 2016, respectively. In 2018, she worked as an assistant professor in Jilin Engineering Normal University and was promoted to full professor in 2020. Her research interests include non-aqueous Li-ion and Li-O<sub>2</sub> batteries investigated by in situ electrochemistry techniques.



## 报告题目：高效 MOF 光催化材料的理论预测

报告人：吴新平

华东理工大学 [xpwu@ecust.edu.cn](mailto:xpwu@ecust.edu.cn)

### 摘要：

相比传统的光催化材料，金属有机框架（MOF）材料具有一些独特的特点和优势，如结构丰富、可后修饰、孔径可调等。随着近年来 MOF 材料的快速兴起，掀起了一股利用 MOF 作为光催化材料的研究热潮。光催化材料通过吸收光子产生光生电子和空穴，产生的电子和空穴能够驱动氧化还原反应，进而将光能转化为化学能。将光生电子和空穴进行有效分离能够显著增加载流子寿命，从而提升光催化反应性能。在本次报告中，我将介绍我们团队近年来在高效 MOF 光催化材料的理论预测方面的系列研究工作<sup>[1-4]</sup>。例如，我们提出在 MOF 材料中掺入四价铈（Ce<sup>4+</sup>）能够促进 MOF 连接子中的激发电子向 MOF 节点中的金属转移，实现光生电子和空穴的空间分离，并基于此提出含 Ce<sup>4+</sup>的 MOF 材料应当具有很好的光催化前景，为高效光催化 MOF 材料的设计提供了方向<sup>[1]</sup>。

### 参考文献：

- [1] X.-P. Wu, L. Gagliardi, D. G. Truhlar, *J. Am. Chem. Soc.*, 2018, 140: 7904-7912.
- [2] X.-P. Wu, L. Gagliardi, D. G. Truhlar, *J. Chem. Phys.*, 2019, 150: 041701.
- [3] T.-T. Liu, T.-F. Liu, X.-P. Wu, X.-Q. Gong, *J. Phys. Chem. C*, 2021, 125: 2064-2073.
- [4] T.-T. Liu, X.-P. Wu, X.-Q. Gong, *J. Phys. Energy*, 2021, DOI: 10.1088/2515-7655/abf41b.

### 个人简介：

华东理工大学工业催化研究所、计算化学中心特聘研究员，博士生导师，上海市稀土学会第七届理事会理事。2011年7月获华东理工大学应用化学（材料化学）专业学士学位，2016年6月获华东理工大学工业催化专业博士学位，2016年7月至2019年10月在美国明尼苏达大学（University of Minnesota）化学系从事博士后研究。吴新平研究员主要从事理论与计算化学研究，涉及量子力学和分子力学组合（QM/MM）方法和程序开发、分子力场拟合、催化理论计算等，研究的材料主要包括金属有机框架（MOF）、共价有机框架（COF）、金属以及金属氧化物等。至今已发表专著1部（章）以及期刊论文36篇，其中以第一或通讯作者在 *Phys. Rev. Lett.*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Nat. Commun.*、*J. Chem. Theory Comput.*、*ACS Catal.*等期刊上发表论文27篇。作为主要开发者开发了计算化学程序 QMMM。作为负责人承担上海市“科技创新行动计划”扬帆计划项目以及国家自然科学基金青年科学基金项目各1项。2020年入选上海市海外高层次人才项目。





## 报告题目：理论设计和靶向合成无金属二维 C<sub>4</sub>N-COF 光电催化 OER 催化剂

报告人：杨照地

哈尔滨理工大学 yangzhaodi@163.com

**摘要：**具有适当 CN 比、特定 N 位置和能带结构的新型二维共价有机骨架 (2D-COF) 的定向设计和制备是特定功能光电催化剂研究的挑战。基于第一性原理密度泛函理论 (DFT)，理论计算了两个具有特定 CN 比的二维多孔类石墨烯结构 *h*-C<sub>2</sub>N 和 *h*-C<sub>3</sub>N<sub>2</sub> 几何结构和电子性质，对比 *h*-C<sub>2</sub>N 和 *h*-C<sub>3</sub>N<sub>2</sub> 能带结构与析氧电极电位发现其可用于 OER 反应催化剂。沿着这个思路，设计了一种与 *h*-C<sub>2</sub>N 和 *h*-C<sub>3</sub>N<sub>2</sub> 具有相同吩嗪连接方式但孔径介于两者之间的全新 2D-COFs (COF-C<sub>4</sub>N)。理论上计算和对比了 *h*-C<sub>2</sub>N、COF-C<sub>4</sub>N 和 *h*-C<sub>3</sub>N<sub>2</sub> 能带结构，计算了它们模型结构 OER 反应路径中吸附中间体 OH\*、O\* 和 OOH\* 自由能，分析了催化反应机理，预测 COF-C<sub>4</sub>N 具有潜在的 OER 性能。理论计算的驱动下，通过三苯六胺 (TPHA) 和六酞环己烷 (HKH) 的溶剂热反应，一种新型吩嗪连接 COF-C<sub>4</sub>N 成功合成。结构分析证实 COF-C<sub>4</sub>N 具有有序的晶体结构、高度共轭平面结构和更好的稳定性。COF-C<sub>4</sub>N 表现优秀 OER 性能，在 10 mA cm<sup>-2</sup> 时具有 349 mV 的低过电位和 64 mV dec<sup>-1</sup> 的 Tafel 斜率。突出的 OER 性能归因于好的结晶度和稳定性、适当带隙以及特定 N 位置诱导其周围 C 活性位形成。这种理论驱动设计和靶向合成 OER 光电催化剂的策略为进一步开发无金属清洁能源材料提供新途径。

### 参考文献：

- [1] Yang, C. H.; Yang, Z. D.\*; Dong, H.; Sun, N.; Lu, Y.; Zhang, F.-M. and Zhang, G. Theory-Driven Design and Targeting Synthesis of a Highly-Conjugated Basal-Plane 2D Covalent Organic Framework for Metal-Free Electrocatalytic OER. *ACS Energy Lett.* **2019**, *4*, 2251–2258.
- [2] Yang, C. H.; Yang, Z. D.\*; Zhang, R.; Zhang, G. L., Band Structures Tuning for 2D Porous Graphene-Like Sheets with Specific CN Stoichiometric Ratio: Theoretical Investigation. *Chem. Phys.* **2019**, *517*, 104-112.

### 个人简介：

哈尔滨理工大学材料科学与化学工程学院，教授，博士，硕士生导师。2008 年 6 月获吉林大学物理化学专业博士学位。2012 年哈尔滨理工大学材料科学与工程博士后流动站出站；2012.8-2013.8 和 2019.9-2020.9 两次国家公派访问学 University of Nebraska-Lincoln(美国内布拉斯加州大学林肯分校)。

主要从事光电功能材料方面的研究：(1) 新型低维光电催化材料的设计、制备、性能研究以及光电催化机理的实验与理论研究 (2) 有机非线性光学材料的理论计算研究。(3) 电子输运性质理论研究。

主持或参与国家级和省部级项目 10 余项，获得黑龙江省科技进步奖 2 项，黑龙江省高校科技奖 2 项，发表 SCI 论文 40 余篇。近几年作为第一作者和通讯作者的代表作有 *ACS Energy Lett.* **2019**, *4*, 2251–2258; *Applied Catalysis B: Environmental.* **2020**, *277*, 119199; *Applied Catalysis B: Environmental*, **2020**, *276*, 119173. *Advanced Science* **2020**, 2001543. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 12106-12110; *J. Mater. Chem. A* **2014**, *2*, 14876-14882; *Org. Lett.* **2015**, *17*, 940-943; *J. Mater. Chem. C* **2015**, *3*, 9637-9649; *ACS Catalysis* **2014**, *4*, 763-773; *J. Mater. Chem. C* **2014**, *2*, 2902-2907。



## 报告题目: Activity of nanomaterials in catalytically tuning reactive oxygen species

报告人: 高兴发

国家纳米科学中心 [gaoxf@nanoctr.cn](mailto:gaoxf@nanoctr.cn)

### 摘要:

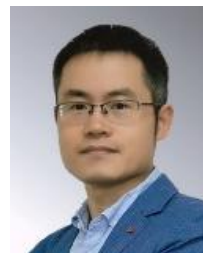
The activities of inorganic nanomaterials (NMs) in catalytically tuning reactive oxygen species (ROS) underlie many biological effects of the materials, which are therefore of great importance in both basic chemistry and therapeutic applications of the materials. However, although many NMs have been experimentally demonstrated to catalyze the chemical conversion of ROS such as  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{O}_2$ , and  $\text{O}_2^{\cdot-}$ , the principles governing the activities remain elusive, hindering the in-depth understanding of the biological effects of the NMs and the rational design of the NMs for bio-applications. The complexity of these catalytic systems has added to the difficulties in developing the principles. In the past several years, we have studied the mechanisms for inorganic NMs to catalyze the dismutation of  $\text{H}_2\text{O}_2$  and  $\text{O}_2^{\cdot-}$  and the oxidation of organic molecules by  $\text{H}_2\text{O}_2$  and  $\text{O}_2$ .<sup>[1,2]</sup> On the basis of the microscopic thermodynamics and kinetics of these catalytic processes, we have developed the prediction model for the activity of NMs in catalyzing the reactions between  $\text{H}_2\text{O}_2$  and organic molecules.<sup>[3]</sup> In this presentation, these progresses made in our group will be reviewed. Particularly, our recent progress on the principles governing the activity of NMs in catalytically scavenging  $\text{O}_2^{\cdot-}$  will be discussed. Through this talk, the power of computation in exploring the mechanisms and structure-activity relationship for chemical interactions at the nano-bio interfaces will be highlighted with example studies.<sup>[4]</sup> Its potential in the rational design and high-through screening of NMs toward catalytically tuning ROS in the biosystems will also be prospected.<sup>[5]</sup>

### 参考文献:

- [1] Shen, X.; Liu, W.; Gao X. J.; Lu, X.; Wu, X.;\* Gao X.\*, *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137, 15882-15891.
- [2] Gao, M.;# Wang, Z.;# Zheng, H.; Wang, L.; Xu, S.; Liu, X.; Li, W.; Pan, Y.; Wang, W.; Cai, X.; Wu, R.; Gao, X.;\* Li, R. \*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 3618-3623.
- [3] Shen, X.; Wang, Z.; Gao, X.;\* Zhao, Y., *ACS Catal.* 2020, 10, 12657-12665.
- [4] Wu, J.;# Wang, Z.;# Jin, X.; Zhang, S.; Li, T.; Zhang, Yi.; Xing, H.; Yu, Y.; Zhang, H.; Gao, X.;\* Wei, H. \*, *Adv. Mater.*, 2021, 33, 2005024.
- [5] Liu, J.;# Wang, L.;# Shen, X.; Gao, X.;\* Chen, Y.; Liu, H.;\* Liu, Y.; Yin, D.; Liu, Y.; Xu, W.; Cai, R.; You, M.; Guo, M.; Wang, Y.; Lia, J.; Li, Y.; Chen, C. \*, *Nano Today*, 2020, 34, 100907.

### 个人简介:

高兴发, 国家纳米科学中心研究员, 博士生导师, 兼任中国生物物理学会纳米酶分会副会长, 中国生物物理学会纳米生物学分会和材料生物学分会委员。课题组主要从事纳米-生物界面化学的计算和模拟研究, 研究医用催化材料的分子机制、预测模型和计算机辅助设计。提出并发展纳米催化调控活性氧新理论, 揭示纳米催化材料生物学效应的物理化学本质和规律, 并同实验工作者合作将理论成果应用于纳米抗菌、抗氧化、抗肿瘤等生物医学应用研究, 为后者提供理论分析和计算设计。



## 报告题目：华信鼎成 HPC 解决方案及产品介绍

报告人：闫俊丽

华信鼎成 [yanjunli@hxps.com.cn](mailto:yanjunli@hxps.com.cn)

### 摘要：

概述专业的高性能计算解决方案设计和服务，在用户平台设计，搭建及运维过程中提供的帮助。

第一，根据用户的应用特征，使用场景，使用习惯，为用户设计和优化整个系统平台，让复杂的异构的环境能统一调度管理起来。

第二，帮助用户保护投资的最大化，克服各种系统的瓶颈，让系统能更好的服务于科研计算。

第三，加速系统平台的工作效率，通过简单的操作页面，降低使用门槛，集中专注于平台的应用。

第四，兼顾系统将来持续扩充的需求，通过提供的可靠的基础框架，实现将来的平滑的系统扩容。

第五，提供完备安全保护机制，通过完善权限管理，密集管理，数据备份等功能，保护用户数据的安全性，系统的安全性以及操作的安全性。

### 个人简介：

闫俊丽，北京华信鼎成科技有限公司高性能计算产品经理，自2009年起至今一直从事与HPC行业解决方案及软件应用相关的设计、开发、运维工作，负责HPC产品规划、解决方案设计及市场拓展，带领团队曾服务于国家重点实验室，大型科研机构，军工企业及高等院校，用良好的解决方案与及优秀的服务意识，为用户解决过众多要求苛刻的计算难题。



报告题目：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

报告人：徐来

苏州大学 [xulai15@suda.edu.cn](mailto:xulai15@suda.edu.cn)

摘要：

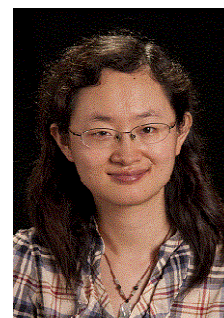
水的全分解反应作为一种新型有效的双向催化反应，近来受到研究者的青睐。如何选择合适的高效的水全解催化剂至关重要。近来的研究手段也着眼于催化前，催化中，以及催化后反应的表征分析，更为科学地反映了催化机理研究的全套过程。本报告利用密度泛函理论在催化前预测了铁掺杂  $\text{Ni}_2\text{P}$  中 HER 与 OER 中的不同中间体的吸附性能同时实现水的全分解的可能性，尤其是氧气析出反应的路径。催化反应发生后，继续利用密度泛函理论解释相变的新产物并阐释了活性位点转移到了相变新产物中。DFT 计算证明 HER 发生后铁掺杂的  $\text{Ni}_2\text{P}$  会保持，OER 发生后转化成 Fe/P 掺杂的  $\gamma\text{-NiOOH}$ ，作为真正的 OER 高活性的活性位点。

参考文献：

- [1] Hao Sun,# Yuxiang Min# Wenjuan Yang# et al. Zhao Deng,\* Lai Xu,\* and Yang Peng\* Morphological and Electronic Tuning of  $\text{Ni}_2\text{P}$  through Iron Doping toward Highly Efficient Water Splitting *ACS Catalysis* 2019, 9, 8882-8892.

个人简介：

本科毕业于北京大学学士学位，博士毕业于美国加州大学洛杉矶分校(University of California, Los Angeles)。现为苏州大学功能纳米与软物质研究院，教授，博士生导师，课题组负责人。加盟苏州大学独立工作以来，以独立通讯发表在 *Nano.Lett.*, *J.Phys.Chem.Lett.* 等国际期刊。与实验合作以通讯作者先后发表在 *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 等国际期刊。独立主持国家自然科学基金重大研究计划培育项目，以及国家自然科学基金青年科学项目。近年来，主要荣誉包括：江苏省双创博士（世界名校类），苏州市紧缺人才，江苏省六大人才高峰，美国化学会化学计算组科研杰出奖，南加州科工学会奖学金等。



## 报告题目：复合催化剂的理论研究

报告人：谭婷

国家纳米科学中心 [tant@nanoctr.cn](mailto:tant@nanoctr.cn)

### 摘要：

具有优异催化活性的均相分子催化剂负载在固体表面，得到的复合催化剂能够有效融合均相和异相催化剂的优点，提高了催化剂的稳定性，且具有可调控性和选择性高等优点，具有极大的发展潜力。复合催化剂可用于析氧反应（OER）中。研究表明，氧化铱（ $\text{IrO}_2$ ）是高效的 OER 催化剂，具有较好的稳定性，但是作为异相催化剂，具有可调控性差、反应机理分析困难的缺点。含 Ir 的分子形态的均相催化剂在 OER 中的应用也得到了广泛的研究，催化活性和选择性高的 Ir 氧化物分子，通常稳定性低，难以与底物分离。在这个工作中，我们采用密度泛函理论研究了铱氧化物分子负载于  $\text{IrO}_2$  和  $\text{TiO}_2$  表面所形成的复合催化剂的稳定性和催化活性。我们发现不同聚合程度的 Ir 氧化物分子均能吸附在  $\text{IrO}_2$  和  $\text{TiO}_2$  表面，吸附在  $\text{TiO}_2$  表面的双聚体复合催化剂具有更低的过电位，但是稳定性较  $\text{IrO}_2$  表面低。通过对载体表面的修饰，比如掺杂等，可以对复合催化剂的稳定性和催化活性进行更精细的调控，因此我们进一步研究了掺杂对  $\text{TiO}_2$  载体表面的影响。掺杂得到的复合催化剂，可以兼顾稳定性和催化活性，且降低了贵金属铱的负载率。复合催化剂也可以用于催化氧还原反应（ORR）。过渡铁金属酞菁（FePc）分子材料作为一类非贵金属电催化剂，由于其本身低成本、易于制备等特点，被广泛应用于电催化 ORR。在这个工作中，我们把 FePc 分子通过范德华相互作用直接负载，或者通过吡啶（Py）共价连接在  $\text{MoS}_2$  表面形成复合催化剂。研究发现，复合催化剂 FePc/ $\text{MoS}_2$  中均相催化剂 FePc 通过分散连接在固体表面，提高了催化剂的稳定性和原子利用率。尤其是在 FePc/ $\text{MoS}_2$ -Py 体系中，Fe-N 共价作用极大地提高了氧在催化剂上的吸附，从而提高了其催化性能和稳定性。

### 个人简介：

谭婷，国家纳米科学中心研究员。博士毕业于普林斯顿大学，师从 Emily A. Carter 教授，其后在宾夕法尼亚大学做博士后研究，并于 2019 年获中科院百人计划资助加入国家纳米科学中心理论室任研究员。主要关注纳米催化反应和环境化学反应机理的第一性原理研究及其在可再生能源发展中应用，在燃料的燃烧性质和催化反应方面取得若干成果。





## 报告题目：基于图注意力网络的团簇性质预测

报告人：赛琳伟

河海大学 [sailinwei@hhu.edu.cn](mailto:sailinwei@hhu.edu.cn)

### 摘要：

对于稍大尺寸的团簇来说，其能量和性质的第一性原理计算耗时较大，尤其是全局搜索要做大量第一性原理计算，计算量已无法接受。本工作采用深度学习技术预测团簇的能量、力等性质。用 L-BFGS 优化调用能量和力的神经网络，代替第一性原理计算，在计算速度上有几个数量级的提高！

理论上，距离矩阵包含了团簇的所有信息。很多人采用键长和键角的提取特征作为输入特征，我们发现该特征提取方式会丢失信息。考虑正六边形和反三棱柱，两者具有相同的距离信息（不考虑顺序）。为了更好的区分这种情况，我们在特征中还加入了环的信息。

团簇可以用图神经网络来预测。在特征聚合过程中，没有采用经典的求和，而是采用了注意力机制：根据中心原子、邻接原子和边的特征计算出的系数做加权平均。注意力机制具有原子顺序置换不变性，且能将邻接原子对中心原子的影响区别对待。

我们还发现，网络中加入批归一化层能显著提高准确率。我们对  $\text{Si}_{36}$  团簇做了测试，训练集大小为 60 万个结构。能量预测精度为 0.11 meV/atom。

### 个人简介：

河海大学理学院副教授，毕业于大连理工大学赵纪军老师课题组。长期从事团簇结构搜索相关研究。开发团簇结构全局搜索软件 CGA。发表论文 20 多篇。主持国家自然科学基金青年项目等纵向和横向项目 8 项。



## 报告题目：Cr 基二维材料的层间磁性与层状超分子晶体中的电荷序

报告人：季威

中国人民大学 [wji@ruc.edu.cn](mailto:wji@ruc.edu.cn)

### 摘要：

自 2017 年首次得到剥离的单层并验证其铁磁性以来，二维磁性材料以来得到了广泛的关注。越来越多的证据表明，二维材料的层间磁耦合显著影响着其宏观磁性。然而，现有的磁耦合机制大多是在对传统典型化学键结合材料体系的认识上的，他们在由非共价相互作用主导的二维材料层间是否继续有效还不得而知。本次报告将汇报我们最近利用第一性原理计算并结合部分实验结果对这一问题的探索。研究结果表明，二维磁性材料层间滑移、层间垂直方向弛豫和材料层数均可调控其宏观磁性，实现层间或层内反铁磁——铁磁转变，并在具体材料  $\text{CrI}_3^{[1]}$  和  $\text{CrX}_2$  ( $\text{X}=\text{S}/\text{Se}/\text{Te}$ )<sup>[2-5]</sup> 中讨论了这几种机制，把层间的 Pauli 相互作用引入了经典 Hubbard 模型中，理解了  $\text{CrSe}_2$  层数依赖的层间磁耦合机制。

尽管电荷密度波、磁性和超导等许多量子物态已经在典型化学键结合的低维（二维）体系中实现。然而，是否可能设计零维构筑单元及其对称性，在通过非共价相互作用结合的层状超分子晶体中实现上述新奇电子态是个未知且有趣的问题。这里，我们利用具有高度对称性的  $\text{Au}_6\text{Te}_{12}\text{Se}_8$  (ATS) 零维无机分子，构筑了其层状表面，利用理论计算结合扫描隧道显微镜/谱 (STM/S) 与 ARPES、输运测量和拉曼光谱研究了 ATS 表面的电荷序的温度依赖关系。该分子间的  $\text{Te}\dots\text{Te}$ 、 $\text{Te}\dots\text{Se}$  和  $\text{Se}\dots\text{Se}$  非共价相互作用是分子间的主要相互作用。与  $\text{Te}$  和  $\text{Se}$  单质类似，这些非共价相互作用具有很强的类共价特征。电子能带结构预示着一个沿着  $x$  方向的三聚结构，并于 120 K 下可以被实验观测到。此外，沿着  $y$  方向在布里渊区  $Y$  点的平带预示了一个额外的电荷序。实验发现，原本菱形的表面分子态在这一电荷序出现时会退化成三角形，又因为三聚体中的分子间非共价相互作用，三聚体中出现了额外的、相互关联的“上-中-下”结构。

### 个人简介：

季威，中国人民大学物理学系教授。2008年从中国科学院物理研究所获得博士学位，随后在加拿大McGill大学从事博士后研究，2010年进入中国人民大学工作。研究兴趣主要为发展和应用独特的第一性原理计算方法，与实验紧密结合，模拟和预测低维量子系统和信息材料与器件的界面前沿问题。研究成果被选为2011年国际邮票素材、入选2013中国科学十大进展、2014年和2015年中国百篇最具影响国际学术论文。2015-2016年获得三个国家级青年人才计划或创新项目支持，2019年入选中科院青促会首批特邀会员。目前担任中国材料研究学会计算材料学委员会委员，青委会理事；ACS Applied Electronic Materials副主编，Science Bulletin、Chinese Physics B、《物理学报》和Frontiers of Physics编委





## 报告题目：二维材料中新奇能谷物理的理论探索

报告人：马衍东

山东大学 [yandong.ma@sdu.edu.cn](mailto:yandong.ma@sdu.edu.cn)

### 摘要：

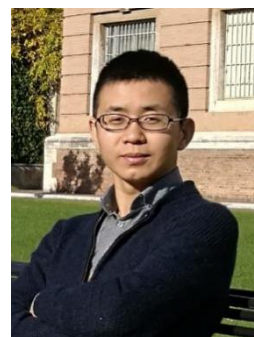
所谓能谷是指布洛赫电子能带中的极值点，包括导带的极小值点或价带的较大值点。当一个体系具有两个或者两个以上能量简并不等价的极值点时，如果它们可以被动态的极化和探测，那么这些能谷就可以形成分立的自由度，即能谷自由度。基于对能谷自由度的操控可以用来进行信息的处理和存储，由此产生了能谷电子学。因此，若想利用能谷，就需要产生能谷极化。通常，能谷极化用外加条件创造，但这在实验和应用上具有很大挑战性。

通过第一性原理计算，我们发现了一系列具有实验可行性的二维能谷材料。这些材料中的能谷极化是自发发生的，不需要任何外加手段调控，其源于材料的本征时间反演对称破缺和空间反演对称破缺。且在强 SOC 作用下，这些材料都具有较大的能谷极化值，这有利于对能谷性质的进一步调控。这种自发的能谷极化可以避免外部调控手段产生能谷极化所带来的挑战。

除了六角体系中的能谷性质，四方体系中的能谷性质以及层谷耦合作用也开始引起人们的关注。然而，目前发现的四方体系在考虑 SOC 作用之后会有 Rashba 效应的干扰，其会破坏能谷性质。为此，我们提出了一种新的设计思路来设计新型的四方能谷体系。在这种新型的四方能谷体系中，其能谷性质在 SOC 作用下是稳定的。此外我们还给出了其产生能谷极化的物理机制。

### 个人简介：

马衍东，山东大学物理学院教授，博士生导师。2009年本科毕业于山东大学；2014年博士毕业于山东大学；2014年到2017年在德国做博士后研究；2017年加盟山东大学物理学院，获聘山东大学齐鲁青年学者。目前主要从事计算物理方向的基础研究，在二维材料的性质调控、应用探索方面做出了一些具有鲜明特色的工作。在包括J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed.、ACS Nano、Phys. Rev. B等期刊上发表SCI文章130余篇。其中，影响因子大于10的22篇，个人文章总被引次数7000余次，8篇论文入选ESI高被引论文，个人h因子41，入选2020年爱思唯尔中国高被引学者榜单。



## 报告题目：材料计算中电子轨道的实空间分析

报告人：付召明

云南师范大学 [fuzhm1979@163.com](mailto:fuzhm1979@163.com)

### 摘要：

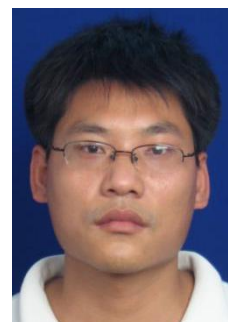
材料的物理、化学特性与其电子局域轨道在实空间的结构和取向往往存在某种内在的联系。目前有不只一种方法获取材料中电子的局域轨道。最大局域化瓦尼尔函数方法是其中重要的方法之一。围绕材料计算中电子轨道的实空间分析这一主题，我们将讨论一下几方面的内容：1.研究材料中局域轨道的意义是什么，以及为什么局域轨道的结构和取向对理解材料性质是重要的。2.如何计算局域轨道。3.结合我们最近两年的工作，简要展示局域轨道分析在理解和研究单原子活性和二维铁电性方面的重要作用。我们的工作有望对其它方向的研究带来启发。

### 参考文献：

- [1] 付召明, Haotian Chen et al, *Phys. Rev. B*, 2021, DOI:10.1103/PhysRevB.00.005300.
- [2] 付召明, Bowei Yang, et al, *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 125, 156001.
- [3] 付召明, Meng Liu, et al, *Phys. Rev. B*, 2019, 99, 205425.

### 个人简介：

付召明，云南师范大学物理与电子信息学院副教授，博士生导师。近年来围绕铁电，磁性及表面系统的第一性原理模拟，取得了一系列原创性成果，提出了基于前线轨道理解单原子催化活性的思路。近5年来，以第一作者在PRL, PRB, APL, npj Quantum materials等期刊上发表学术论文多篇，主持1项基金委 NSFC项目。



## 报告题目：光照下的角动量流

报告人：周健

华南理工大学 [jianzhou@scut.edu.cn](mailto:jianzhou@scut.edu.cn)

### 摘要：

随着纳米电子学的发展，人们追求更高、更快速的电子响应。因此，除了电子的电荷以外，新自由度（如自旋、轨道、谷等）进入了人们的视野，从而引起了近几十年的自旋电子学等领域的蓬勃发展。在光电转换过程（例如光生伏打效应等）中，光照导致的电子跃迁可以产生光致电流，获得较大的光伏效应。在这一过程中，并不需要 p-n 结或异质结构，而仅需要材料的空间结构不对称性即可实现，因而在近年来引起了人们的广泛关注。这一过程本质上是一种非线性光学过程，主要包括双光子-单电子相互作用。本工作将这一理论推广至角动量自由度，包括轨道角动量和自旋角动量的运动（流）。我们利用二阶 Kubo 微扰理论，建立了光激发下的角动量流电导公式，并计算了一系列二维铁电材料的角动量流。结果发现，在对称性止的光电流方向上，事实上电子仍在运动。它们携带着角动量自由度，因此可以获得纯自旋/轨道角动量流。同时我们指出，虽然在平衡态中，材料的轨道磁矩（尤其是非磁材料）由于轨道淬灭效应仅贡献很小的磁性，但是当考察光致角动量流时，轨道角动量流可以非常大，而且它几乎不受自旋轨道耦合效应的影响。而自旋角动量流的大小则正比于自旋轨道耦合强度。这一工作对实验上获得自旋/轨道注入提供了新的思路，光学操控手段也比之前的电学手段具有易调控、非接触、少杂质等优势。

### 个人简介：

周健，西安交通大学材料学院教授。2004-2013年在北京大学攻读学士和博士学位，2013-2018年在美国弗吉尼亚联邦大学和麻省理工学院从事博士后研究。2018年入选国家级海外高层次人才（青年）计划并回国工作。主要从事低维材料的第一性原理计算研究，目前研究兴趣集中在材料非线性光学响应、自旋/轨道电子学等方面。迄今以第一/通讯作者身份在PNAS, PRL, Nano Letters, JACS, Angew等杂志上共发表40篇论文，论文总引用4500余次，h因子28，入选“爱思唯尔中国高被引学者（材料科学与工程）”。主持/参与国家自然科学基金、国家重点研发计划（青年）等项目。



## 报告题目：亚 10 nm 晶体管研究进展

报告人：吕劲

北京大学 [jinglu@pku.edu.cn](mailto:jinglu@pku.edu.cn)

### 摘要：

统治半导体工业 50 年的摩尔定律正逼近其物理极限。硅 MOSFET 目前门长已经缩短到 18 nm，继续缩短其尺寸，其性能大为下降。低维的 2D 和 1D 材料具有极薄的厚度，门的静电控制能力比块体硅显著增强，同时表面光滑没有悬挂键，有利于载流子运输，被国际装置与系统路线图（IRDS）列为是未来电子器件的候选沟道材料之一。

第一原理的量子输运模拟提供了精确预测晶体管性能的工具。我们首先用第一原理的量子输运方法模拟再现了实验的纳米碳管亚 10 nm 晶体管的结果。发现典型的 2D 半导体磷烯， $WSe_2$ ,  $InSe$ ,  $Bi_2O_2Se$ ,  $GeSe$ , 硅烷 MOSFET 显示了极好的表现，能够把摩尔定律延续到 1 nm 的物理门长。2D 隧穿晶体管显示除了比 MOSFET 的能量延迟积，尤其适合低功耗的器件。载流子的有效质量对晶体管性能有关键性的影响。最后，我们提供了拓扑晶体管的模拟，证明了它能工作。

### 个人简介：

吕劲 北京大学物理学院研究员。1997年博士毕业于北京大学物理学院。教育部新世纪人才。日本学术振兴会（JSPS）特别研究员。陕西理工大学“汉江学者”计划特聘教授。获庆祝中华人民共和国成立70周年纪念章。研究成果获得2020年陕西高等学校科学技术二等奖，并被提名2020年国家自然科学奖二等奖。入选爱斯维尔2020年中国高被引学者（物理学），2020年全球前2%顶尖科学家“生涯影响力”和2020全球前2%顶尖科学家“年度影响力”榜单。



在二维狄拉克材料能隙调控及器件设计、系统精确模拟亚10 nm二维半导体晶体管、精确计算晶体管中二维半导体与金属界面的范式、二维材料光伏器件、二维自旋电子学研究方面研究等方面取得了一系列的进展。发表SCI文章超过260篇，包括：Progress in Materials Science（1篇），Reports on Progress in Physics（1篇），Physical Review Letters（2篇），Journal of the American Chemical Society（7篇），Nano Letters（4篇），Advanced Materials（6篇），Advanced Functional Materials（1篇），ACS Nano（4篇），Angewandte Chemie（1篇），ACS Energy Letters（1篇），NPG Asia Materials（2篇），2D Materials（2篇），Chemistry of Materials（3篇），Small（2篇），Carbon（2篇）。被Nature, Science, Nature Materials, Nature Nanotechnology, Physical Review Letters, Journal of the American Chemical Society等SCI杂志引用超10000次，单篇最高总被引次数超过960次（《Nano Letters》, 12(1), 113-118 (2011)，是目前二维原子晶体器件完全第一性原理模拟论文中引用最高的论文），H因子50（Web of Science），有12篇通讯作者论文进入ESI高被引用论文（1%），1篇通讯作者进入ESI热点论文（1%），23篇论文引用超过100次。

## 报告题目：基于分子的低维磁性材料的理论设计

报告人：武晓君

中国科学技术大学 [xjwu@ustc.edu.cn](mailto:xjwu@ustc.edu.cn)

### 摘要：

自旋电子器件应用电子的自旋量子特征进行信息的传输、存储与处理，是未来信息技术的重要载体。其中，发展先进的低维磁性材料是发展纳米自旋电子器件的基础。在过去几十年里，人们探讨了各种具有特殊磁性的低维材料，包括烯磁半导体、半金属材料、双极磁性半导体等。如何将半金属特性与拓扑性质结合起来，可以发展一些具有复合功能的低维磁性材料，是发展未来自旋电子器件的一个研究热点。我们运用第一性原理电子结构计算方法，结合紧束缚模型，提出从分子轨道出发设计低维磁性材料的设计方法。研究表明，通过选择合适的配体分子与金属，可以有效的将磁性与拓扑结构结合起来，实现材料的复合磁性性能。这种设计策略可以扩展到有机金属框架材料、金属氧化物、氮化物等多种结构。

### 参考文献：

- [1] Li, X.; Lv, H.; Dai, J.; Ma, L.; Zeng, X.; Wu, X.; Yang, J. *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 6290.
- [2] Lv, H.; Wu, D.; Li, X.; Wu, X.; Yang, J. *J. Mater. Chem. C* 2018, 6, 11243
- [3] Wan, Y.Y.; Wang, L.; Xu, H.X.; Wu, X.J.; Yang, J.L. *J. Am. Chem. Soc.* 2020,

### 个人简介：

武晓君，中国科学技术大学化学与材料科学学院教授。2000与2005年于中国科学技术大学获理学学士与化学博士学位。2005至2010年在美国内布拉斯加州大学林肯分校从事博士后研究工作。2010年起在中国科学技术大学化学与材料科学学院工作。主要围绕低维功能材料开展结构



预测、功能设计、与机理研究，研究成果包括发展基于化学键理论的分  
子拓扑方法，预预言了二维硼结构，提出了可见光响应的全光解水非金属催化材料新概念，设计了一些具有室温磁性的低维自旋电子材料，设计的材料得到实验验证；预测了二维硼单层与多层结构，揭示低维材料量子态的耦合与调控机理，提出表界面化学活性的电荷/缺陷调控策略，指导相关实验研究。迄今已发表论文260余篇，被引14000余次，H因子68。



## 报告题目：纯无机钙钛矿材料中缺陷容忍性的第一性原理计算研究

报告人：孙宜阳

中国科学院上海硅酸盐研究所 [yysun@mail.sic.ac.cn](mailto:yysun@mail.sic.ac.cn)

### 摘要：

卤族钙钛矿材料近年来在光伏和光电子领域获得广泛关注。缺陷容忍性被认为是这类材料性能优异的关键原因。然而，卤族钙钛矿中缺陷容忍的物理起源目前尚没有定论。本研究采用 HSE 杂化泛函结合自旋轨道耦合 (SOC) 计算研究了  $\gamma$  相  $\text{CsPbI}_3$  的本征缺陷性质。基于足够大的计算超胞和充分的结构弛豫，我们确认 SOC 效应不仅显著影响电子结构，同时对势能面，如局域缺陷结构等，也有显著影响。我们确认施主缺陷的缺陷容忍性来源于 Pb 的强 SOC 效应，但 SOC 对受主缺陷的影响不明显，该材料对受主缺陷的容忍性主要来源于价带的反键属性。相比于  $\gamma$  相， $\alpha$  相  $\text{CsPbI}_3$  存在静态不稳定性，对其缺陷的计算如果采用传统方法会存在很大随机性，我们提出了基于分子动力学模拟来研究其缺陷容忍性。最后，简要介绍硫化物钙钛矿材料中缺陷容忍性研究的最新进展。

### 个人简介：

孙宜阳，研究员，博士生导师。1996年本科毕业于吉林大学材料科学系，1999年硕士毕业于厦门大学物理系，2004年博士毕业于新加坡国立大学物理系，获凝聚态物理学博士学位。2004年至2010年先后于新加坡国立大学、美国可再生能源国家实验室和美国伦斯勒理工学院做博士后。2010年至2017年于伦斯勒理工学院物理系任研究助理教授和研究科学家，2017年至今任中国科学院上海硅酸盐研究所研究员，主要研究方向是基于第一性原理计算的材料物性研究与新材料设计，已发表科研论文120篇，被引用4300次。作为分会主席组织了美国MRS春季大会的2018年钙钛矿材料分会和2021年离子型半导体材料分会。





## 报告题目：金属-多层二维半导体异质结中的费米能级退钉扎

报告人：石兴强

河北大学 [shixq20hbu@hbu.edu.cn](mailto:shixq20hbu@hbu.edu.cn)

### 摘要：

For two-dimensional (2D) semiconductors using in electronic/optoelectronic devices, it is inevitable to connect them to external circuitry with metallic leads. One of the bottleneck problems of 2D semiconductors' device application is the high contact resistance. There are two main reasons for the high contact resistance: interface scattering and Fermi-level pinning between metal and 2D semiconductors (even for the ideal interface). The former can be neglected for a high-quality interface, while the latter is related to the intrinsic characteristics of (the ideal) interface. Metal-semiconductor junctions (MSJ) with monolayer 2D semiconductors have been well understood, but MSJ with multilayered 2D semiconductors is not well understood. Here we report our works of MSJ with multilayered MoS<sub>2</sub> based on first-principles density-functional theory calculations. We find that, although strong Fermi-level pinning exists right at the metal/1st-layer MoS<sub>2</sub> interface, there is a depinning effect between MoS<sub>2</sub> layers away from the metal electrode surface. Base on the above finding, we propose an extended Fermi-level pinning theory and probe its possible application in optoelectronic devices. We then reveal the mechanism of charge redistribution at the different interfaces of metal-MoS<sub>2</sub> and MoS<sub>2</sub>-MoS<sub>2</sub> in metal-multilayered MoS<sub>2</sub> junctions, and extend our study to the junctions of metal electrode with 2D polar semiconductors that have an intrinsic electric-dipole.

### 参考文献：

- [1] Qian Wang, Yangfan Shao, Penglai Gong and Xingqiang Shi\*, *J. Mater. Chem. C*, **8**, 3113 (2020).
- [2] Qian Wang, Yangfan Shao and Xingqiang Shi\*, *J. Chem. Phys.* **152**, 244701 (2020).
- [3] Yangfan Shao, Qian Wang, Hui Pan\* and Xingqiang Shi\*, *Adv. Electron. Mater.* **6**, 1900981 (2020).

### 个人简介：

Prof. Xingqiang Shi got his BSc degree in 2002 from Hebei Normal University, Department of Physics and PhD degree in 2007 from Institute of Solid-state Physics, Chinese Academy of Science. After more than five years postdoctoral researches in Department of Physics at the City University of Hong Kong, he joined Southern University of Science and Technology as an Assistant Professor and Associate Research Fellow of Department of Physics in 2013. Now he is a Professor and group leader of Computational Condensed Matter Physics at School of Physical Science and Technology, Hebei University. His research interests include computational condensed matter physics and computational materials science.



## 报告题目：碘化物二维磁性材料及其输运性质

报告人：袁宏宽

西南大学 yhk10@swu.edu.cn

### 摘要：

开发具有高居里温度、强磁性、大磁各向异性能的二维铁磁单层材料并将它们构建为范德华异质结，探寻其优异的自旋输运性质是发展下一代自旋电子学器件材料的关键。基于二维范德华铁磁材料的重大应用需求和近期相关的科学突破<sup>[1-5]</sup>，我们结合密度泛函理论、分子动力学、蒙特卡洛模拟、非平衡格林函数等计算方法，系统地研究了 5d 过渡金属三碘化物  $TMI_3$  (TM = 5d) 单层材料的结构稳定性、磁性和电子性质<sup>[6]</sup>，设计了三明治结构的  $Ag|Gr|2ML-CrI_3|Gr|Ag$  和  $Cu|Li_{0.5}CrI_3|Si/Ge|Li_{0.5}CrI_3|Cu$  范德华异质结，研究了它们的电磁性质和自旋输运性质。研究结果发现：(1)  $TMI_3$  单层结构均能稳定地存在，大部分体系表现磁性半导体性质，拥有较高的磁各向异性能，其中  $TaI_3/OsI_3/PtI_3$  具有 750K/220K/200K 的高居里温度；(2)  $Ag|Gr|2ML-CrI_3|Gr|Ag$  异质结拥有  $2 \times 10^4\%$  的 TMR 值和 100% 自旋过滤效应；(3)  $Cu|Li_{0.5}CrI_3|Si/Ge|Li_{0.5}CrI_3|Cu$  体系具有高达  $2 \times 10^3\%$  的 TMR 值、100% 的自旋过滤效应、11-18 meV 的磁各向异性能、130 K 的居里温度。我们设计出的这些材料拥有优异的电磁特性和自旋输运性质，它们具有在自旋阀、磁隧道结等自旋电子学器件中应用的巨大潜力。

### 参考文献：

- [1] Burch, K. S.; Mandrus D.; Park J. G., *Nature* 2018, 563: 47.
- [2] Gong C.; Zhang X., *Science* 2019, 363: 706.
- [3] Song, T.; Cai, X.; et al., *Science* 2018, 360: 1214.
- [4] Kim, H. H.; Yang, B.; et al., *Nano Lett.* 2018, 18: 4885.
- [5] Huang B.; et al, *Nature* 2017, 546: 270.
- [6] Li B. G.; Yuan H. K.; et al, *J. Chem. Phys.* 2020, 152: 244704.

### 个人简介：

袁宏宽，教授，博士生导师，西南大学物理科学与技术学院副院长，重庆物理学会常务理事，教育部大学物理课程教学指导委员会西南地区委员、大学物理实验专项委员会委员，重庆市科学技术带头人后备人选。2009 年于苏州大学获博士学位，2004 年 7 月-至今，在西南大学物理科学与技术学院任教。长期从事从事团簇物理化学、低维纳米结构材料、自旋电子学等领域的理论计算研究，先后在 *Phys. Rep.*, *Phys. Rev. B*, *J. Alloy. Compound.*, *J. Chem. Phys* 等物理类和材料类国际主流刊物上发表 SCI 论文 120 余篇；主持国家自然科学基金 2 项、重庆市科研项目 3 项、西南大学校级项目 5 项；获重庆市自然科学奖三等奖 1 项；出版“十二五”规划教材 1 部。



## 报告题目：纳米尺度材料与器件热、电输运与热电转换机理研究

报告人：陈克求

湖南大学 [keqiuchen@hnu.edu.cn](mailto:keqiuchen@hnu.edu.cn)

### 摘要：

纳米尺度功能材料、结构和器件的广泛应用，依赖于对其物理、化学性质的理解、掌握和调控的完整度、精细度和精确度。从输运性质来看主要由几个基本载流子，如声子、电荷、自旋等及其它它们之间的相互作用影响着器件以及材料的物理性质。在分子尺度材料与器件物理性质的理论计算中，如何处理引入外场之后电子-声子、声子-声子、自旋-轨道、自旋-声子的相互作用仍是目前学术界一个具有挑战性的难题。

近年来，我们系统地探索了纳米尺度材料与器件热、电输运理论与热电转换机理：（一）系统研究了电子-声子相互作用及范德瓦尔斯相互作用对分子器件中电学性能的影响[JMC A 7, 21976(2019); Phys. Rev. Applied 13, 014064 (2020); JMCC 8,3758 (2020)]; 发现通过调控自旋与量子干涉效应可实现纯自旋流电子器件[JMCA 7, 19037(2019)]、在磁性分子结中实现了一个可开关的自旋过滤器[Adv. Elect. Mater. 2000689 (2020)]; 与实验合作，发现分子器件具有电子共振输运特性[JA CS 138, 11140 (2016)]和优异的负微分电阻特性[JA CS 140, 570 (2018)]; 与实验合作研究了二维材料的应变机制，通过理论计算验证了该二维材料高度各向异性 [Nat. Commun. 11, 1151 (2020)]。（二）在纳米尺度器件热输运机理方面做了一系列探索[Adv. Funct. Mater. 30, 1903829 (2020); Acs Appl. Mater. & Inter. 12, 15517 (2020); PRB (In Press, 2021)]; 发现了两种重要的热整流机理—声子驻波 [APL 105, 203111 (2014)]和声子局域共振[APL 2018, 113: 121906]; 通过采用电极掺杂结合电化学门控方法实现了对弱耦合分子结热导的有效调控[Sci. China-Phys. Mech. Astron. 63, 276811 (2020)]。（三）系统探索了有机功能分子器件热电转换机制与热电性能调控[Adv. Funct. Mater. 30, 1903873 (2020)]; 通过在居间耦合分子结中引入新的转动自由度可实现连续可调谐声子干涉效应，能够对分子器件的热电性能进行更为精确的调控[JMCA 8, 11884 (2020); APL 118, 183103 (2021)]。

### 个人简介：

陈克求，湖南大学物理与微电子科学学院教授，博士生导师，副院长。主要研究方向为（1）纳米/分子体系电子输运与热输运理论；（2）热电、光电功能材料与器件计算设计。在国际重要学术期刊上发表了 270 余篇学术论文，入选爱思唯尔 2020 中国高被引学者。担任《Frontier of Materials》等多个学术期刊编委。



## 报告题目: **Topological quantum states in two-dimensional magnets**

报告人: 牛成旺

山东大学 [c.niu@sdu.edu.cn](mailto:c.niu@sdu.edu.cn)

### 摘要:

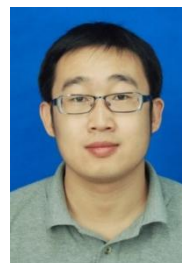
Magnetic topological states open up exciting opportunities for exploring fundamental topological quantum physics and innovative design of topological spintronics devices. A famous example is the AFM topological insulator (TI) state, which, however, was still not observed in two dimensions. Using a tight-binding model and first-principles calculations, we show that, in contrast to previously observed AFM topological insulators in three dimensions, an AFM TI can emerge in two dimensions as a result of a nonsymmorphic symmetry that combines the twofold rotation symmetry and half-lattice translation<sup>[1,2]</sup>. In addition, we demonstrate that a highly robust magnetic topological insulator phase, which remains intact under both ferromagnetic and antiferromagnetic configurations, can emerge in two dimensions as well<sup>[3]</sup>. The nontrivial topologies of the proposed magnetic insulating states are confirmed by the direct calculation of the spin Chern number, Wannier charge centers, and the nontrivial topological edge states. Our results improve the understanding of the relationship between band topology and magnetic structure in two-dimensional materials.

### 参考文献:

- [1] C. Niu, H. Wang, N. Mao, B. Huang, Y. Mokrousov, and Y. Dai, *Phys. Rev. Lett.* 124, 066401 (2020).
- [2] N. Mao, H. Wang, X. Hu, C. Niu, B. Huang, and Y. Dai, *Phys. Rev. B* 102, 115412 (2020).
- [3] H. Wang, N. Mao, X. Hu, Y. Dai, B. Huang, and C. Niu, *Mater. Horiz.* 8, 956 (2021).

### 个人简介:

牛成旺, 教授、博士生导师, 山东大学齐鲁青年学者。从事材料的结构设计、电子结构调控和拓扑量子态等相关的理论研究工作, 揭示了二维铁磁/反铁磁拓扑绝缘体的形成机制, 提出了混合拓扑半金属 (mixed topological semimetal) 的新概念, 证明了拓扑绝缘体和拓扑晶体绝缘体间的拓扑相变以及在材料中可共存。预言的拓扑材料 Na<sub>3</sub>Bi 单层、Bi<sub>1</sub>Te<sub>1</sub> 已得到 Nature、Nat. Commun. 刊载文章中相关实验验证。系统性的研究工作在 Phys. Rev. Lett.、Nat. Commun.、Mater. Horiz.、Nano Lett.、Phys. Rev. B 等国际知名学术期刊上发表 SCI 论文近 50 篇。



## 报告题目：复杂应变下强共价材料的结构和物性调控

报告人：李全

吉林大学 [liquan777@jlu.edu.cn](mailto:liquan777@jlu.edu.cn)

### 摘要：

复杂应变极端环境是静水压力、单轴压力和剪切力等调控手段的叠加。相比具有一维调控参数的静水压力条件，复杂应变极端条件将调控参数拓展至独立的六维变量空间，显著增加了材料结构和物性的调控维度，拓展了物质科学研究的相空间，有望理论获得常规条件下无法获得的新结构、新性质和新现象。我们发展和完善了晶体结构的定向约束、控制和优化方法和程序，构建了多种正压力和剪切力共存的极端环境。我们系统开展了  $BC_3$ <sup>[1]</sup>、金刚石<sup>[2-3]</sup>、过渡族金属硼化物<sup>[4-6]</sup>和过渡族金属氮化物<sup>[7]</sup>等强共价材料在复杂应变环境下晶体结构、动力学稳定性、电子性质和电-声相互作用等物理性质的调控行为研究，确定了材料在复杂应变下的结构形变、应力响应和理想强度极限，确定了原子尺度的结构断裂机理，优化和赋予了典型强共价材料新奇多功能特性（如结构延展性、内禀电子传导性和超导电性等），为新型强共价材料的结构设计、性能优化和功能特性拓展，以及高压实验测量和仪器改造提供了知识储备。

### 参考文献：

- [1] M. Zhang, H. Liu, Q. Li, B. Gao, Y. Wang, H. Li, C. Chen, and Y. Ma, *Phys. Rev. Lett.* 114, 015502 (2015).
- [2] C. Liu, X. Song, Q. Li, Y. Ma, and C. Chen, *Phys. Rev. Lett.* 123, 195504 (2019).
- [3] C. Liu, X. Song, Q. Li, Y. Ma, and C. Chen, *Phys. Rev. Lett.* 124, 147001 (2020).
- [4] Q. Li, D. Zhou, W. Zheng, Y. Ma, and C. Chen, *Phys. Rev. Lett.* 110, 136403 (2013).
- [5] Q. Li, D. Zhou, W. Zheng, Y. Ma, and C. Chen, *Phys. Rev. Lett.* 115, 185502 (2015).
- [6] W. Gong, C. Liu, X. Song, Q. Li, Y. Ma, and C. Chen, *Phys. Rev. B (R)* 100, 220102 (2019).
- [7] W. Lu, H. Zhai, Q. Li, and C. Chen, *J. Phys. Chem. Lett.* 12, 1985 (2021).

### 个人简介：

李全，吉林大学教授，长期从事新型强共价材料的结构设计及物性模拟研究。发表 SCI 论文 90 多篇，含 8 篇 *Phys. Rev. Lett.*（3 篇一作，3 篇通讯）、1 篇 *Nature Commun.*（通讯作者）和 1 篇 *CPL Express Letters*（通讯作者），研究成果被 *Nature News*, *Sciencedaily* 等国外科学媒体亮点报道。获自然科学基金委优青基金资助、国家自然科学基金二等奖（排名第四）和中国高压学会授予的“优秀青年科学家奖（Excellent Young Scientist Award）”。任中国晶体学会高压专业委员会理事和中国材料研究学会青年工作委员会理事，被聘为《物理学报》和 *Chin. Phys. B* 刊物



青年编辑、*Chin. Phys. Lett* 刊物客座编辑，被评为 2019 年度英国物理学会杰出审稿人。学术贡献如下：（1）确定了室温后石墨超硬高压相结构，命名为 M-碳，解决了其 50 年悬而未解的超硬碳的结构之谜，并被后续实验证实，M-碳已作为碳家族的专有名词广泛使用；（2）发现钻石在复杂应力下的奇异结构延展性、电子传导性和超导特性，丰富了钻石的内禀属性，与其固有的“标签属性”形成了鲜明对比，为解释超高压实验中的热点争议问题提供了新思路和探索方向；（3）引入拉普拉斯矩阵修正了硬度模型，发展出超硬材料的逆向设计方法和程序，理论确定了系列新型超硬/高硬材料的结构和物性，改变了过渡族金属的轻元素化合物研究中“轻元素比例越高，材料的硬度/强度越大”的这一传统认识。



## 报告题目：类黑磷二维热电材料的结构设计：尺寸优化与界面调控

报告人：李煜

深圳大学 [liyu@szu.edu.cn](mailto:liyu@szu.edu.cn)

### 摘要：

以 SnSe 为代表的类黑磷结构材料具有本征低晶格热导率与各向异性的电输运性能，有利于获得优异的热电性能。其二维化的晶体结构与强弱键形成的强非谐性赋予了独特的电、声输运机理与调控策略。我们基于密度泛函理论、玻尔兹曼输运方程与形变势理论，探讨了二维尺寸对类黑磷结构热电性质的重要影响，并基于层间弱相互作用提供的层堆叠自由度，设计了二维异质结热电材料，证实了二维垂直堆叠材料可产生有效的电子结构、输运性能和热电性能的调控作用。此外，我们揭示了 V-V 族二元烯也是一类具有优异性能的热电材料。

二维 SnTe 具有类黑磷晶体结构，计算表明该材料的电导率、Seebeck 系数均随层数的增加迅速衰减，导致在 2 nm 以上的低维化优势衰微。该研究表明二维化热电材料所具有的性能优势对尺寸条件要求很严格，为实验研究提供了一定的理论指导。

类黑磷晶体结构的层间弱相互作用有利于构建异质结界面，通过理论研究异质结界面对热电材料电输运性能的影响，可为实验中比较模糊的界面作用提供一定的理论依据。我们系统研究了双层 SnSe-SnS 异质结结构的电输运性能，并揭示了异质结界面作用与普通层间作用的异同。异质结界面的层间耦合作用导致了电荷分布变化，对不同方向与载流子类型的调控作用各异。其中在 p 型的 armchair 方向，我们发现异质结结构具有显著优于同质结构的功率因子。

此外，在成分设计方面，我们基于 V-V 二元化合烯的热电性能预测，探究了二元化合对 V 族热电材料的电导率、Seebeck 系数等热电参数的影响。

### 个人简介：

李煜，深圳大学材料学院，副教授，硕士生导师。深圳市海外高层次人才(B类)。2013 获得中国科学技术大学-香港城市大学联合双博士学位。2008 年本科毕业于山东大学材料科学与工程学院基地班。研究领域为基于第一性原理的新能源材料设计与性能调控(热电、光电)及类黑磷热电材料的实验研究。主持国家自然科学基金、广东省自然科学基金、深圳市高端人才研究项目与基础研究项目。以第一作者或通讯作者在 Adv. Funct. Mater. (IF>15)等国际知名期刊发表研究论文 30 余篇，科研成果被 Materials views China 报道，申请专利 3 项。





## 报告题目：理论模拟在水泥熟料合成中的应用

报告人：赵瑞奇

河南理工大学 [zhaoruiqi@hpu.edu.cn](mailto:zhaoruiqi@hpu.edu.cn)

### 摘要：

水泥的巨大需求导致高品位石灰石储量急剧减少，同时工业的快速发展导致产生大量的固体废弃物，探索替代高品位石灰石的原材料或者充分利用这些废弃物生产水泥熟料成为水泥行业可持续发展迫切需要解决的问题。含 Mg 量高的低品质石灰石和固体废弃物含有大量的重金属离子，如 Mg、Ba、Pb、Zn、Cr 等。为解决上述问题，关键之处在于厘清这些元素在水泥熟料相中的固溶行为及其对各组成相的影响。

水泥熟料是复杂的混合物体系。以产量和消耗量最大的硅酸盐水泥为例，它主要由硅酸三钙、硅酸二钙、铝酸三钙和铁铝酸四钙组成。探索异质元素在水泥体系的固溶行为具有很大的挑战性。本报告将结合实验和理论模拟，讲述 Mg<sup>[1]</sup>、Zn<sup>[2]</sup>、Cr<sup>[3]</sup>、Pb<sup>[4]</sup>等离子在硅酸盐水泥和硫铝酸盐水泥中的固溶行为和机理，为利用低品质原料生产水泥提供一些理论参考和指导。

### 参考文献：

- [1] Ruiqi Zhao, Li Zhang, Guangxin Fan, Yang Chen, Gailing Huang, Haibo Zhang, Jianping Zhu, Xuemao Guan,\* Probing the exact form and doping preference of magnesium in ordinary Portland cement clinker phases: A study from experiments and DFT simulations. *Cement Concr. Res.* 2021, 144, 106420.
- [2] Jianping Zhu, Kuo Yang, Yang Chen, Guangxin Fan, Li Zhang, Benkai Guo, Xuemao Guan, Ruiqi Zhao,\* Revealing the substitution preference of zinc in ordinary Portland cement clinker phases: A study from experiments and DFT calculations, *J. Hazard. Mater.* 2021, 409, 124504.
- [3] Ruiqi Zhao, Li Zhang, Benkai Guo, Yang Chen, Guangxin Fan, Zuquan Jin, Xuemao Guan, and Jianping Zhu, Unveiling substitution preference of chromium ions in sulfoaluminate cement clinker phases, *Composites Part B*, accepted.
- [4] Jianping Zhu, Yang Chen, Kuo Yang, Li Zhang, Benkai Guo, Guangxin Fan, Xuemao Guan, Ruiqi Zhao,\* Revealing the doping mechanism of barium in sulfoaluminate cement clinker phases, *J. Clean. Prod.* 2021, 295, 126405.

### 个人简介：

博士，副教授，河南省微尺度理论模拟与设计创新团队带头人，2008年毕业于北京师范大学，2008年至今在河南理工大学工作，期间，2011年4月-2013年3月在北京大学刘忠范教授课题组从事博士后研究工作，2013年3月-2013年8月在北京计算科学研究中心丁峰教授课题组访问，2016年4月-2017年4月分别在波多黎各大学陈中方教授课题组、Rice大学 Boris Yakobson 教授课题组访问。

近年来主要从事低维材料、水泥熟料等材料的结构、性质和生长机理的多尺度理论模拟，在 *Cement Concrete Res.*、*J. Hazard. Mater.*、*J. Clean. Prod.*、*J. Mater. Chem. A*、*Nano Res.*、*Nanoscale*、*J. Phys. Chem. C*、*Phys. Chem. Chem. Phys.*等国际知名期刊发表 SCI 论文 50 余篇；先后主持国家自然科学基金、河南省自然科学基金等省部级及以上项目 10 项；作为第一完成人先后荣获河南省科技进步奖三等奖 1 项、河南省教育厅科技成果奖一等奖和二等奖各一项。



## 报告题目：二维金属基化合物的结构设计与其性能研究

报告人：周晓成

南京师范大学 [xczhou@njnu.edu.cn](mailto:xczhou@njnu.edu.cn)

### 摘要：

二维材料因量子限域而表现出独特的物理化学性质，在诸多领域具有广阔应用前景。近年来，自旋电子器件和量子信息技术因良好的信息存储和传输功能，逐渐引起研究者的广泛关注。通过理论计算来寻找新型功能化二维材料，并对其基本性质和性能调控进行系统研究，可有效缩短新材料和新技术的研发周期。我们基于第一性原理计算并结合高通量筛选方法，预测了上百种全新二维金属基化合物材料，它们涵盖了从金属性到绝缘性的多种电子性质，包括金属性、半导体性、铁磁金属性、铁磁半导体性、反铁磁半导体性、拓扑性等。我们对其中的铁磁半导体材料进行了系统的力-电-磁耦合研究，实现了多种磁基态转变。此外，考虑到二维材料在信息领域的应用，我们系统研究了二维过渡金属硫属化合物中位错引起的单光子发射现象，并通过电子掺杂、化学取代以及施加应变对单光子发射性质进行了有效调控。我们的研究将有助于推动二维材料在自旋电子和量子通信领域的应用<sup>[1-3]</sup>。

### 参考文献：

- [1] Zhou, X. C.; Hang, Y.; Liu, L. R.; Zhang, Z. H.;\* Guo, W. L.\* *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, **141(19)**: 7899.
- [2] Zhou, X. C.; Sun, X.; Zhang, Z. H.;\* Guo, W. L.\* *J. Mater. Chem. C* **2018**, **6**: 9675.
- [3] Zhou, X. C.; Zhang, Z. H.;\* Guo, W. L.\* *Nano Lett.* **2020**, **20(6)**: 4136.

### 个人简介：

个人简介：周晓成，女，2011-2020 本科和博士就读于南京航空航天大学。研究方向包括二维材料设计与物性调控、光/电催化理论计算等，主要成果发表于 *J. Am. Chem. Soc.*, *Nano Lett.*, *J. Mater. Chem. C* 等国际期刊。



## 报告题目：基于无轨道密度泛函理论的 ATLAS 计算方法与软件

报告人：王彦超

吉林大学 [wyc@calypso.cn](mailto:wyc@calypso.cn)

### 摘要：

无轨道密度泛函理论 (Orbital-free density functional theory, OF-DFT) 是以量子力学为基础, 仅根据电子密度就可以精确求解多电子体系基态性质的理论。同传统基于轨道的 Kohn-Sham 密度泛函理论 (KS-DFT) 相比, 由于不需要轨道 (波函数) 信息, 其计算量随模拟体系的大小呈线性变化。因此 OF-DFT 可以突破传统 KS-DFT 模拟尺度的极限 (约千原子量级), 成为适合于开展包含百万以上原子的大尺度材料模拟的第一性原理计算方法。利用实空间有限差分方法结合自主发展的动能泛函和定域赝势, 发展出适合于大尺度材料计算的第一性原理 ATLAS 方法<sup>[1-4]</sup>, 并在此基础上, 开发了拥有自主知识产权同名计算软件<sup>[5-6]</sup>, 受中国版权局的计算机软件著作权保护 (登记号: 2016SR027209)。ATLAS 方法和软件的计算效率、精度和稳定性已经通过 Mg、Al 和 Mg-Al 合金体系进行了测试和验证。ATLAS 单核可开展万原子量级材料的第一性原理计算, 通过多核并行可实现百万原子量级的第一性原理模拟。

### 参考文献：

- [1] Xuecheng Shao, Wenhui Mi, Qiang Xu, Yanchao Wang and Yanming Ma, O(NlogN)scaling method to evaluate the ion–electron potential of crystalline solids, *J. Chem. Phys.* 145, 184110(2016).
- [2] W. Mi, S. Zhang, Y. Wang\*, Y. Ma\*, and M. Miao\*, First-principle optimal local pseudopotentials construction via optimized effective potential method, *J. Chem. Phys.* 144, 134108 (2016).
- [3] Q. Xu , Y. Wang\* and Y. Ma\*, Nonlocal kinetic energy density functional via line integrals and its application to orbital-free density functional theory, *Phys. Rev. B* 100, 205132 (2019).
- [4] Q. Xu, J. Lv, Y. Wang\* and Y. Ma\*, Nonlocal kinetic energy density functionals for isolated systems obtained via local density approximation kernels, *Phys. Rev. B* 101, 045110(2020).
- [5] W. Mi, X. Shao, C. Su, Y. Zhou, S. Zhang, Y. Wang\* and Y. Ma\* et al., ATLAS: A real-space finite-difference implementation of orbital-free density functional theory, *Comput. Phys. Commun.* 200, 87(2015).
- [6] X. Shao, W. Mi, S. Wang, Q. Xu, Y. Wang\*, and Y. Ma\*, Large-scale ab initio simulations for periodic system, *Comput. Phys. Commun.* 233, 78(2018).

### 个人简介：

王彦超, 吉林大学教授, 国家优秀青年基金获得者。长期从事计算物理方法和软件研发工作。发展了 CALYPSO 结构预测方法和软件, 被 70 多个国家的 3300 余位学者采用; 开发了无轨道密度泛函 ATLAS 计算软件, 可实现百万原子量级体系的第一性原理计算。在 *Nat. Commun.*、*PRL*、*PNAS* 等期刊上发表论文 100 余篇, 总被引 8500 余次, 单篇最高被引 1600 余次, H 因子 37(引用数据取自 google 学术)。两次获国家自然科学二等奖 (第二和第三完成人); 获教育部自然科学奖一等奖 (第二完成人); 2018 年获亚洲高压协会“亚洲高压会青年奖”; 2020 年入选爱思唯尔“中国高被引学者”。



## 报告题目：单层和少层磷烯边界重构对制备和电子性质的影响

报告人：高峻峰

大连理工大学 [gaojf@dlut.edu.cn](mailto:gaojf@dlut.edu.cn)

### 摘要：

二维材料在合成和应用中往往是微米、甚至纳米尺寸。在如此小的尺寸时，边界对稳定性、生长和电子性质的影响非常重要。边界处原子往往具有悬挂键，从而容易发生边界重构。对于磷烯，我们通过系统的第一性原理计算，揭示了磷烯边重构依赖于衬底相互作用。在相互作用过弱的衬底上，磷烯边很容易扭曲重构，边界难以外延生长<sup>[1]</sup>。我们还揭示了几种新型的二维边界重构方式。单层磷烯锯齿形边极易发生卷曲重构，形成复杂管状边界。这种边界重构是第一次在二维材料中被提出，该边界重构势垒只有 0.23 eV，常温下纳秒时间尺度就可发生，且重构结构降低了 35% 边界能<sup>[2]</sup>。重构后，磷烯锯齿边从金属性转化为典型半导体性质。并且，重构后的磷烯管状边界显著的影响了磷烯纳米带的振动、和热传导特性<sup>[3]</sup>。管状边结构实现电子、空穴的空间分离，并且带隙对纳米带宽度、外加应用敏感，可以实现带隙连续调控，有利于光电器件<sup>[4]</sup>。对于两层以上磷烯，其锯齿形边会发生层间重构，形成闭合边界，极易发生且极大降低边界能。我们通过分子动力学模拟进一步验证了层间重构边界的稳定性。该边界具有独特的振动模式。这一层间边界使得几乎消除了磷烯边界态，提高了载流子迁移率，但也造成单层磷烯难以液相剥离。通过上述研究，我们系统阐述了磷烯从单层到多层的边界重构，以及边界重构对性质的影响<sup>[5]</sup>。

### 参考文献：

- [1] Gao, Junfeng, Zhang, Gang\*, Zhang, Yongwei\*. *J. Am. Chem. Soc.* 2016, 138, 4763.
- [2] Gao, Junfeng, Liu Xiangjun, Zhang, Gang\*, Zhang, Yongwei\*. *Nanoscale*, 2016, 8, 17940
- [3] Xiangjun Liu, Junfeng Gao, Gang Zhang\*, Yong - Wei Zhang. *Adv. Funct. Mater.* 2017, 27, 1702776.
- [4] Xia, Mingyue, Gao, Junfeng\*, Zhao, Jijun\*, unpublished.
- [5] LI, Shiqi, Gao, Junfeng\*, Zhang, Gang\*, Zhao Jijun\*, unpublished

### 个人简介：

高峻峰，大连理工大学，物理学院教授，国家级海外高层次引进青年人才，辽宁省兴辽英才青年拔尖，大连市高端人才。主要从事低维材料生长机理、结构重构、电子和催化性质与应用的研究。以第一性原理计算和经典生长模型，紧密结合实验，研究了在石墨烯、硅烯和磷烯等二维材料的成核机理；通过理论模拟假设，提出了可稳定性磷烯团簇的衬底选择判据；提出了一系列二维材料边界重构结构，以及其对稳定性和关键性质的影响；申请人结合实验观察，理论研究了 Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> 等表面结构，重构以及缺陷的影响，并阐述重构和缺陷对结构稳定性，化学稳定性的影响。在国际知名期刊 *J. Am. Chem. Soc.* (6)、*Angew. Chem. Int. Ed.* (1)、*Nature Comm*(2). *Adv. Mater.* (1), *Adv. Funct. Mater* (3) 等发表 SCI 论文 70 余篇，引用 2,527 次，H 因子 25。成果多次被 *Phys.Org*、*Nanowerk* 等国际科技媒体报道。先后获得教育部，辽宁省等省部级自然自然科学奖二等奖 3 项。担任 *SmartMat* 青年编委和 *Nanoscale Advances* 客座编委。





## 报告题目：二维结构预测发现特定拓扑、功能材料及机制

报告人：张珉

东北师范大学 [mzhang@nenu.edu.cn](mailto:mzhang@nenu.edu.cn)

### 摘要：

随着石墨烯和  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  等二维材料的功能化应用被不断扩展，发现和探索更多功能化二维材料成为材料领域和理论化学的一个重要研究方向。通过对二维结构化学键连和电子拓扑特征的理解，借助 CALYPSO 搜索程序和第一性原理计算，开展具有功能化应用的新型二维单层结构开展设计及功能化研究工作：

(1) 晶体无五重旋转轴,因此之前尚无全局最低能的纯平面五配位结构被报道,我们认定以  $\text{C}_2\text{@TM}_6$  作为周期性环结构是获得纯平面五配位的最简途径,并验证 CoC, NiC, CuC 对应碳化物均为全局最低能结构且表现出不同的磁性特征;(2) 提升金属离子电池负极材料的能量密度,是使其能够应用于大型能量存储设备的前提。对此搜索得到的纯平面多孔的  $\text{NiC}_3$  和  $\text{B}_7\text{P}_2$  单层材料,总结了二维单层材料作为金属离子电池负极材料应具备的三个基本特征:纯平面的拓扑结构、均匀分散的孔洞和恰当的孔尺寸;(3) 寻找能够促进 C-C 键偶合是还原  $\text{CO}_2$  到高能量附加值的多碳产物关键之一,对此借助于含有多催化位点的  $\text{Ni}_2\text{B}_5$  单层材料,证实 CO 分子在不同催化位点之间的有效迁移是降低 C-C 键偶合能垒和提升催化活性不可忽略的重要前提;(4)长距离异核双金属位点可有效吸附和活化  $\text{N}_2$  且是获得  $\text{NH}_3$  的有效途径,对此借助于高通量筛选,验证 12 种稳定的  $\text{MM}'\text{B}_7$  三元单层材料中 9 种结构能够有效促进  $\text{N}_2$  的活化和还原,并抑制氢还原副反应。

### 参考文献：

- [1] C. Zhu, H. Lv, X. Qu, M. Zhang, J. Wang, S. Wen, Q. Li, Y. Geng, Z. Su, X. Wu, *J. Mater. Chem. C* 2019, 7, 6406-6413.
- [2] C. Zhu, X. Qu, M. Zhang, J. Wang, Q. Li, Y. Geng, Y. Ma, Z. Su, *J. Mater. Chem. A* 2019, 7, 13356-13363.
- [3] C. Zhu, S. Lin, M. Zhang, Q. Li, Z. Su, Z. Chen, *J. Mater. Chem. A* 2020, 8, 10301-10309.
- [4] C. Zhu, C. Wang, M. Zhang, H. Chen, Y. Geng, Z. Su, *ACS Appl. Mater. Interf.* 2021, 13, 3845-3855.
- [5] C. Zhu, C. Wen, C. Wang, M. Zhang, Y. Geng, Z. Su, *J. Mater. Chem. A*, 2021, 9, 10855-10868.

### 个人简介：

东北师范大学化学学院副教授/博士生导师, 1999年和2006年分别获东北师范大学化学学院学士和博士学位; 2008年至2011年在丹麦奥胡斯大学从事博士后研究工作。2014年任副教授。主要从元素差异、化学键本质及电子相关作用等基本特性开展理论及计算化学研究。先后主持国家自然科学基金面上项目、国家自然科学基金青年项目、吉林省自然科学基金面上项目和吉林省教育厅项目等。在 *Appl. Catal. B: Environ.*、*Chem. Sci.*、*J. Mater. Chem. A/C*、*ACS Appl. Mater. Interfaces*、*ACS Sustainable Chem. Eng.*、*J. Power Sources* 等杂志累计发表SCI论文80余篇, 论文总引用1000余次。同时兼任SCI杂志《Molecules》(IF 4.411, ISSN 1420-3049)的编委。主要代表性学术贡献包括: a. 统一价键理论和分子轨道理论在  $\text{C}_2$  分子四重键上的争议; b. 扩展 Be-Be 元素化学成键至双键、三键和中性单电子键; c. 多种多价态的稳定平面多配位键连及功能化; d. 二维材料遴选和功能化应用。



**报告题目: Charge doping induced two-step reversible structural phase transitions and electromechanical actuation in two-dimensional 1T'-MoS<sub>2</sub>**

**报告人: 邓俊楷**

西安交通大学 [junkai.deng@mail.xjtu.edu.cn](mailto:junkai.deng@mail.xjtu.edu.cn)

**摘要:**

The 1T' phase of transition metal dichalcogenides (TMDs) is a low symmetry charge density wave (CDW) phase, which can be regarded as a periodically distorted structure (Peierls distortion) of the high symmetry 1T phase. Here, using density functional theory (DFT) calculations, we report that the positive charge (hole) injection is an effective method to modulate the Peierls distortion of MoS<sub>2</sub> 1T' for new CDW phase and superior electromechanical properties. A new stable CDW phase is discovered at hole doping level of  $\sim 0.10h^+$ /atom, named as 1T<sub>i</sub>'. The hole charging and discharging can induce a reversible phase transition of MoS<sub>2</sub> among the three phases, 1T, 1T' and 1T<sub>i</sub>'. Such reversible phase transition leads to superior electromechanical properties including a strain output as high as -5.8% with a small hysteresis loop, multi-step super-elasticity, and multi-shape memory effect, which are valuable in active electromechanical device designs at nanoscale. In-depth analysis on the change of electronic structure under hole doping was performed to understand the new CDW phase and the observed phase transition. Using charge doping to modulate the Peierls distortion in two-dimensional materials can serve as a general concept for nano-active material designs.

**个人简介:**

邓俊楷, 西安交通大学材料科学与工程学院教授。主要从事多尺度材料计算模拟研究, 致力于低维纳米材料, 铁性智能材料和新能源材料的设计和开发。近年来, 在 JACS、Nat. Commun、Adv. Mater、Nanoscale、PRB Rapid Communications 等期刊发表 SCI 论文 40 余篇, 其中 ESI 高被引论文 4 篇; 论文它引 1000 余次。主持科研项目 20 余项, 其中包括 3 项国家自然科学基金委 NSFC 项目, 1 项国家重点研发计划项目(子课题), 2 项国防基础科研计划项目(子课题), 1 项陕西省自然科学基金基础研究计划等。





## 报告题目: **Engineering the anion ordering and ferroelectricity in heteroanionic perovskite for photocatalytic and photovoltaic applications**

报告人: 缙高阳

西安交通大学 [gougaoyang@mail.xjtu.edu.cn](mailto:gougaoyang@mail.xjtu.edu.cn)

### 摘要:

Heteroanionic perovskite materials are burgeoning area of inorganic materials research, owing to their abilities to achieve desirable functional properties through accommodating anions of different size, charge, and electronegativity. Especially, as B-site cations are bonded with multiple anions, bonding asymmetry inside each octahedron can produce local structural polarity within heteroanionic perovskite, and after aligning the local dipoles of each acentric unit, long-range ferroelectric ordering can arise. Emergence of spontaneous ferroelectricity in heteroanionic perovskite can lead to important applications, including visible-light-active photocatalysis and bulk photovoltaic effect. In this talk, I will present our recent work on heteroanionic perovskite, including Ruddlesden–Popper oxynitride  $\text{Ca}_3\text{Nb}_2\text{N}_2\text{O}_5$ <sup>[1]</sup> and Perovskite sulfur diiodide  $\text{MASbSI}_2$ <sup>[2]</sup>. The complex configuration space of heteroanionic perovskite will be explored by comprehensive first-principles calculations and further rationalized by bond-strength sum analysis derived from crystal chemistry principles. Special focus will be paid to understand the interplay between anion ordering and spontaneous ferroelectricity. In the end, visible-light-active photocatalysis of  $\text{Ca}_3\text{Nb}_2\text{N}_2\text{O}_5$  and bulk photovoltaic effect in  $\text{MASbSI}_2$  associated with the spontaneous ferroelectricity will also be simulated.

### 参考文献:

- [1] Gaoyang Gou\*, Min Zhao, Jing Shi, Jaye K. Harada and James M. Rondinelli\*, *Chem. Mater.* 32, 2815–2823 (2020).  
[2] Min Zhao, Hua Wang, Gaoyang Gou\*, Xiangdong Ding\* and Jun Sun, *Mater. Today Phys.* (2021), accepted.

### 个人简介:

缙高阳, 西安交通大学前沿科学技术研究院特聘研究员。2009年7月于中国科学技术大学获得凝聚态物理专业博士学位, 随后在美国宾夕法尼亚大学化学系开展博士后工作。2012年入职西安交大前沿院。缙高阳的主要研究方向包括: 设计具有半导体特性的新型钙钛矿铁电光伏材料, 通过铁电光伏效应实现对于太阳能的高效吸收与利用; 采用基于第一性原理的高通量材料挖掘方法, 在材料数据库中筛选新型低维铁电材料, 为实现铁电材料器件化提供理论支持。目前以第一通讯作者的身份在 *J. Am. Chem. Soc.*, *ACS Nano*, *Nano Energy*, *Chem. Mater.*, *Mater. Today Phys.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, *Phys. Rev. B* 等期刊共发表文章近二十余篇, 另

外与实验组合作的文章发表在 *Nature* (封面文章), *Nat. Commun.*, *Adv. Funct. Mater.* 等期刊上。迄今为止, 申请主持国家自然科学基金青年项目、面上项目和国家重点实验室开放课题等多项基金课题。



## 报告题目：半经典广义朗之万分子动力学

报告人：吕京涛

华中科技大学 [jtlu@hust.edu.cn](mailto:jtlu@hust.edu.cn)

### 摘要：

基于Langevin方程的分子动力学模拟被广泛应用于研究不同种类物质的平衡和非平衡态性质。通常情况下，系统的原子动力学使用经典的运动方程来描述，而外界的环境可以通过涨落和耗散来引入。但在很多情况下，我们需要考虑原子核的量子效应或者外部环境的非平衡统计性质等因素。一个典型的例子是表面物理化学领域关心的，金属表面的单分子在外场驱动下的动力学行为。这里，我们给出解决这一问题的一个简单有效的解决方案。从全量子的 Feynman-Vernon 路径积分出发，我们得到一个可以描述非平衡、量子环境的广义 Langevin 方程。<sup>[1]</sup>我们将该方程与基于密度泛函理论或经验势模型的程序相结合，考虑了单分子热导、电流作用下的分子动力学等行为。<sup>[2-4]</sup> 这为进一步理解非平衡环境中的单分子动力学提供了新的方案。

### 参考文献：

- [1] J. T. Lü, B.-Z. Hu, P. Hedegaard, M. Brandbyge, *Prog. Surf. Sci.*, 94, 21 (2019).
- [2] J. T. Lü, S. Leitherer, N. R. Papior, M. Brandbyge, *Phys. Rev. B*, 101, 201406 (2020).
- [3] B.-Z. Hu, L. L. Nian, J. T. Lü, *Chin. Phys. B*, 29, 120505 (2021).
- [4] G. Li, B.-Z. Hu, N. Yang, J. T. Lü, in preparation.

### 个人简介：

吕京涛，华中科技大学物理学院教授。2001 年和 2006 年分别在清华大学和中科院上海微系统与信息技术研究所获得学士和博士学位。2006-2013 年分别在新加坡国立大学、丹麦技术大学、哥本哈根大学从事研究工作。主要从事单分子体系多自由度耦合及能量转换的理论与计算研究。



## 报告题目：计算理解内嵌金属富勒烯

报告人：金朋

河北工业大学 pengjin@hebut.edu.cn

### 摘要：

内嵌金属富勒烯 (Endohedral Metallofullerenes, EMFs) 是在不同尺寸和结构的富勒烯笼内包入各种金属原子或含金属团簇形成的一类重要的富勒烯衍生物, 具有诸多潜在应用价值 (图 1)。密度泛函理论计算在 EMFs 的研究中始终扮演着重要的角色。课题组近年来连续开展了一系列针对内嵌碱土金属、过渡金属、镧系金属、钪系金属富勒烯的计算工作, 确定了它们的准确结构和电子性质, 揭示了笼内金属间、金属 (簇)-碳笼间的相互作用本质, 并从中发现了许多新颖的化学成键方式, 为深入探索 EMFs 的形成和稳定机理提供了必要的理论依据。本次报告中我们将介绍其中部分典型案例, 展示计算对理解 EMFs 的重要作用。

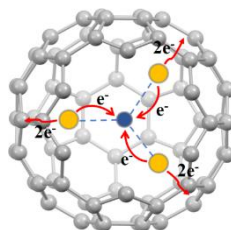
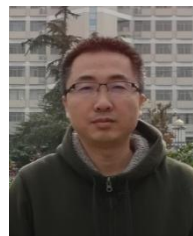


图 1. 代表性 EMF 分子:  $\text{Sc}_3\text{N}@I_h\text{-C}_{80}$

### 个人简介：

金朋, 男, 2010 年于大连理工大学获工学博士学位, 现任河北工业大学特聘教授, 博士生导师。主要研究方向是富勒烯及其衍生物的理论化学计算和能源相关纳米材料的计算模拟。



个人学术主页: <https://publons.com/researcher/2878490/peng-jin/>。目前已在 *J. Am. Chem. Soc.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*(5 篇)、*Chem. Sci.*(4 篇)、*Appl. Catal. B*(2 篇)、*J. Mater. Chem. A/C*(5 篇)、*Chem. Eng. J.*、*Carbon*、*Nanoscale* (2 篇)、*Chem. Commun.* (2 篇)、*ACS Appl. Mater. Interfaces*、*Nano Res.*、*Chem. Eur. J.* (2 篇)、*Inorg. Chem.*(9 篇)、*J. Org. Chem.*(3 篇)、*J. Phys. Chem. A/C*(8 篇)、*Phys. Chem. Chem. Phys.*(5 篇) 等期刊发表同行评议 SCI 论文 96 篇, 并为 *Coord. Chem. Rev.* 撰写 3 篇综述和参编英文著作一部 (第一/通讯作者 72 篇), 文章迄今被正面引用 1500 余次, 个人 h-index: 22。常年作为 *Account of Chemical Research*、*Chemical Communications*、*Inorganic Chemistry* 等期刊审稿人。承担科研课题包括国家自然科学基金和河北省自然科学基金面上项目三项。

## 报告题目：硫基金纳米团簇的结构机制的理论探索

报告人：许文武

宁波大学 [xuwenwu@nbu.edu.cn](mailto:xuwenwu@nbu.edu.cn)

### 摘要：

自 2007 年  $\text{Au}_{102}(\text{SR})_{44}$  晶体结构被 Kornberg 教授课题组首次成功解析出来，硫基金纳米团簇的结构成为了理论和实验研究的热点课题。我们对所有实验结晶的和理论预测的金纳米团簇的金核进行了详细的结构分析，成功地将双电子规则引入到金纳米团簇，建立了一个非常普适的全统一模型 GUM 来描述配体保护的金纳米团簇。<sup>[1,2]</sup>GUM 模型认金团簇的金核可以分解为一系列的三角形  $\text{Au}_3$  和四面体  $\text{Au}_4$  的基本单元(类比于夸克模型中由三个夸克组成的质子或中子)，而且  $\text{Au}_3$  和  $\text{Au}_4$  满足双电子规则。当这些基本单元堆积在一起时，就形成了结构各异的稳定的金纳米团簇的金核。基于 GUM 我们预测了一系列非常稳定的硫基金团簇的结构，其中  $\text{Au}_{36}(\text{SR})_{24}$  纳米团簇的结构得到了实验的证实。<sup>[3-5]</sup>虽然 GUM 实现了对金纳米团簇金核的完全理解，但是仍然缺少可以阐明硫基保护的金纳米团簇的界面相互作用的独特结构模型。我们在对所有 95 个实验结晶和理论预测的硫基金纳米团簇的结构进行全面分析的基础上，提出了一个环模型。<sup>[6]</sup>在环模型中，所有硫基保护的金纳米团簇通常可以看作是几个  $[\text{Au}_m(\text{SR})_n]$  ( $m = 4-8, 10, 12$  和  $0 \leq n \leq m$ ) 环的融合或嵌套。这些环之间的亲金相互作用在硫基保护的金纳米团簇的结构稳定化中发挥关键作用。在 GUM 和环模型的指导下，我们预测出一种新的  $\text{Au}_{42}(\text{SR})_{26}$  异构体，其能量甚至低于以前结晶的两种异构体。

### 参考文献：

- [1] W. W. Xu; B. Zhu; X. C. Zeng\*; Y. Gao\*; *Nat. Commun.*, 2016, 7: 13574.
- [2] W. W. Xu; X. C. Zeng\*; Y. Gao\*; *Acc. Chem. Res.*, 2018, 51(11): 2739-2747.
- [3] W. W. Xu\*; X. Duan; X. C. Zeng\*; *J. Phys. Chem. Lett.*, 2020, 11(2): 536-540.
- [4] P. Liu; W. Han; M. Zheng; W. W. Xu\*; *Nanoscale*, 2020, 12, 20677.
- [5] X. Liu; W. W. Xu; X. Huang; et. al, *Nat. Commun.*, 2020, 11, 3349.
- [6] W. Han; P. Liu; M. Zheng; X. C. Zeng\*; W. W. Xu\*; *J. Phys. Chem. Lett.*, 2021, 12, 3006-3013.

### 个人简介：

许文武，宁波大学物理科学与技术学院教授，博士生导师。2013 年在中国科学院大连化学物理研究所韩克利研究员课题组获博士学位。2013-2016 年在上海应用物理研究所方海平和高崑研究员课题组从事博士后研究工作。2016-2018 年在美国内布拉斯加大学林肯分校曾晓成教授课题组从事博士后研究工作。主要从事配体金纳米团簇的理论研究，首次将双电子和八电子规则引入到金纳米团簇领域，发展了金纳米团簇的全统一模型来理解金核的生长规律；引入 3 中心-4 电子模型理解了“订书针”式的硫基配体的结构特点和特殊的成键机制；发展了描述“订书针”式的硫基配体与金核相互作用的环模型。目前以第一作者和通讯作者身份在 *Accounts of Chemical Research*、*Science Advances*、*Nature Communications* 等期刊发表论文 40 余篇。



## 报告题目：酸性电解水催化剂的理论设计与模拟

报告人：田子奇

中国科学院宁波材料技术与工程研究所 [tianziqui@nimte.ac.cn](mailto:tianziqui@nimte.ac.cn)

### 摘要：

将可再生电能通过电解水反应转化为氢能储存利用，可望推动新能源的利用与“碳达峰”、“碳中和”目标的实现。相比于传统的碱性电解水装置，酸性电解水装置更加紧凑高效，但目前缺乏稳定的阳极材料。我们将理论计算与实验合成、表征相结合，探索了一系列二氧化钌基电极材料，通过过渡金属掺杂，不但可以减少贵金属用量，同时能够调控表面的化学环境，大幅降低阳极反应过电位，并能保持一定的工作稳定性，可望用于未来的酸性电解水产氧装置。

### 参考文献：

- [1] R Ge, L Li, J Su, Y Lin, Z Tian, L Chen. *Advanced Energy Materials* 2019, 9, 1901313
- [2] Y Lin, Z Tian, L Zhang, J Ma, Z Jiang, B Deibert, R Ge, L Chen. *Nature Communications* 2019, 10,162.
- [3] J Su, R Ge, K Jiang, Y Dong, F Hao, Z Tian, G Chen, L Chen. *Advanced Materials* 2018, 30, 1801351.

### 个人简介：

田子奇研究员先后于 2009 年和 2014 年在南京大学物理化学专业取得学士和博士学位，方向为理论与计算化学，之后在美国加州大学河滨分校从事博士后研究工作。2017 年加入中国科学院宁波材料所分离与催化团队研究方向是通过多尺度理论模拟，研究设计用于气体分离和电催化转化的先进材料，采用计算化学方法深入理解复杂体系中的化学反应过程。近五年以第一或通讯作者在 *Nat. Commun.*、*Adv. Mater.*、*Nano Lett.* 等期刊发表论文十余篇。



## 报告题目：基于第一性原理计算的钙钛矿氧化物 OER 的机器学习研究

报告人：刘轶

上海大学 [yiliu@t.shu.edu.cn](mailto:yiliu@t.shu.edu.cn)

### 摘要：

Perovskite-type oxide  $ABO_3$  catalysts can be used to prepare inexpensive, efficient, durable, and environmentally friendly electrochemical energy conversion devices. The numerous combinatorial site substitutions of perovskite oxides provide rich choices of candidates but pose a great challenge to examine all possibilities computationally. The data-driven approach provides an efficient and predictable tool to accelerate the computational materials search based on the machine learning (ML) of the complex composition/structure-property relationships. Inspired by the data-driven materials design approach, we proposed a surface center-environment (SCE) feature model and developed FP based ML methods to predict the adsorption free energies of intermediate species ( $HO^*$ ,  $O^*$ , and  $HOO^*$ ) on the surfaces of perovskite oxides and their overpotentials, critical to evaluating the catalytic performance of oxygen evolution reaction (OER). The SCE feature models contain the elementary properties of substitution elements and the structure information of the perovskite surfaces, demonstrated as an effective description of catalytic reactions on surface in ML models. The ML models predicted that the perovskite oxides adsorb the intermediate species most easily when  $B = Nb, Mo, Ta, W, \text{ and } Os$ , and their overpotentials are low when  $B = Mn, Fe, Co, Ru, Rh, \text{ and } Ir$ . This work demonstrated that the ML methods based on SCE features can be applied to describe surface chemical reactions and accelerate the screening for potential catalysts with target properties.

### 个人简介：

Prof. Yi LIU obtained his Ph. D. degree at Materials Science and Engineering at Institute of Metal Research in China in 1997. Then he had worked in the field of computational materials science at Nagoya University, Japan (1997-2002); Juelich Research Center, Germany (2002-2003); University of Western Ontario, Canada (2003-2005); California Institute of Technology, US (2006-2012). He was a professor at the School of Materials Science and Engineering, the University of Shanghai for Science and Technology between 2012-2015 before he moved to Materials Genome Institute and Department of Physics at Shanghai University (2015-present). His current research interests focus on the materials design for high-performance alloys, combustion, nanomaterials, and catalyst by combining computation (density functional theory and molecular dynamics simulations), machine learning, and high-throughput experiment approaches based on materials genome concept.





## 报告题目：气相金属氢化物团簇活化转化 CO<sub>2</sub>

报告人：李晓娜

中国科学院化学研究所 [lxn@iccas.ac.cn](mailto:lxn@iccas.ac.cn)

### 摘要：

二氧化碳 (CO<sub>2</sub>) 是温室气体重要成分，降低空气中 CO<sub>2</sub> 的含量已引起世界各国的高度重视。CO<sub>2</sub> 无毒、储量丰富、可作为 C1 原料实现碳循环，利用化学方法将 CO<sub>2</sub> 加氢催化转化成酸、醇等化学品，是降低 CO<sub>2</sub> 含量的良好选择。C-H、C-C 等化学键的形成非常重要，其是形成酸、醇等化学品的关键基元反应。CO<sub>2</sub> 分子键能较大、热稳定性较高，反应常在较苛刻条件下进行，温和条件下 CO<sub>2</sub> 的催化转化是一个重要的化学难题。金属氢化物可作为研究 CO<sub>2</sub> 加氢反应的合理模型。在气相条件下，结合飞行时间质谱和理论模拟，研究金属氢化物团簇与 CO<sub>2</sub> 的反应，可在原子分子和电子结构层次认识 CO<sub>2</sub> 活化转化过程关键基元步的反应机制和催化活性位的关键元素组成，进而实现机理导向的催化转化。近期，我们研究了系列气相金属氢化物与 CO<sub>2</sub> 的加氢反应，首次观测到甲酸根的生成，并结合理论分析明确了 C-H 成键的分子水平反应机制。

### 参考文献：

- [1] Jiang, L. X.; Zhao, C. Y.; Li, X. N.; Zheng, W. J.; He, S. G. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56: 4187.
- [2] Liu, Y. Z.; Jiang, L. X.; Li, X. N.; Wang, L. N.; Chen, J. J.; He, S. G. *J. Phys. Chem. C* 2018, 122: 19379.
- [3] Liu, Y. Z.; Li, X. N.; He, S. G. *J. Phys. Chem. A* 2020, 124: 8414.
- [4] Jiang, L. X.; Li, X. N.; He, S. G. *J. Phys. Chem. C* 2020, 124: 5928.
- [5] Liu, Y. Z.; Chen, J. J.; Li, X. N.; He, S. G. *J. Phys. Chem. A* 2021, 125: 3710.

### 个人简介：

李晓娜，中国科学院化学研究所，研究员。2000.09-2011.01：先后在吉林师范大学、吉林大学以及中科院长春应化所获得学士、硕士和博士学位；2011.03-2019.10：在中科院化学所进行博士后研究，并先后任助理研究员和副研究员；2019年11月至今，任中科院化学所研究员。2016年加入中科院青促会，2020年被评为中科院青促会优秀会员；2020年获基金委优秀青年科学基金项目资助。受邀担任《化学通报》编委和《应用化学》青年编委。研究方向为团簇物理化学，利用飞行时间质谱和量子化学理论模拟，研究金属团簇上 CO 催化氧化 ( $2\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2$ ;  $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$ ;  $2\text{CO} + 2\text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + 2\text{CO}_2$ ) 和 CO<sub>2</sub> 催化转化的反应机制。本人以第一或通讯作者在 *Nat. Commun.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *J. Phys. Chem. Lett.* 等期刊上发表论文近 50 篇。



## 报告题目：低维碳材料电催化理论设计

报告人：王颖

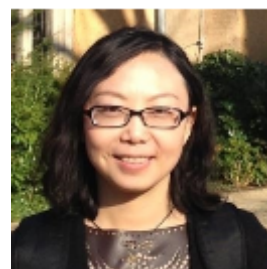
中国科学院长春应用化学研究所 [ywang\\_2012@ciac.ac.cn](mailto:ywang_2012@ciac.ac.cn)

### 摘要：

能源危机与环境污染已成为威胁人类社会生存和发展的两大难题，从化石燃料逐步转向可持续发展无污染的非化石能源是必然趋势。近年来 H<sub>2</sub> 燃料电池、CO<sub>2</sub> 电还原合成高附加值化工产品(CO<sub>2</sub>RR)、N<sub>2</sub> 电还原合成氨(NRR)等新型能源受到了广泛关注。本报告针对如何提高各种电催化剂的催化活性和选择性等关键科学问题，采用理论计算模拟方法，从原子尺度深入探究了多种低维碳材料的催化机制及电化学反应过程中的动力学和热力学规律，揭示了轴向氧和桥位氧及边界(edge)在氧还原反应(ORR)中的作用，明晰了 Rh-N-C 具有较高抗 CO 中毒特性的本质原因，解释了实验现象。通过系统研究酞菁、双原子掺杂石墨及 PC<sub>6</sub> 等体系的 ORR、CO<sub>2</sub>RR 和 NRR 催化活性，给出了几种可能的描述符来评估电催化剂的催化活性，设计并筛选出多种高效廉价的非贵金属多功能电催化剂，为实验研究提供坚实的理论基础。

### 个人简介：

王颖，中国科学院长春应用化学研究所副研究员。多年来一直从事低维碳材料催化性能及可控合成的理论研究。利用第一性原理、密度泛函等方法在燃料电池(原子/分子掺杂、缺陷、过渡金属氮化物等对 ORR 的影响)、电解水(OER)、电催化合成氨(NRR)、Li-O<sub>2</sub> 电池、Li-S 电池、染料敏化太阳能电池 (I<sub>3</sub> - 还原反应 IRR)、有机催化(硝基苯还原生成苯胺、乙醛氧化等反应)等领域中基于低维碳材料的催化剂设计和改良方面取得了系列进展，设计了多种新型、高效和廉价的催化剂。目前以(共同)第一作者或(共同)通讯作者身份在 *Adv. Mater.*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Angew. Chem. Int. Edit.*、*Nat. Commun.*、*ACS. Nano*、*Adv. Funct. Mater.*、*Appl. Catal. B-Environ.*等 SCI 期刊上发表学术论文 94 篇。H-index = 39.



## 报告题目：锕系离子水团簇的饱和配位数研究

报告人：胡憾石

清华大学 [hshu@mail.tsinghua.edu.cn](mailto:hshu@mail.tsinghua.edu.cn)

### 摘要：

核能生产过程中乏燃料的后处理过程、高放废液的处置等是目前制约核能发展的瓶颈。因此如何认识锕系离子在复杂溶液化学环境中的化学行为显得尤为重要。随着计算机技术和人工智能研究的飞速发展，锕系化学的计算机理论模拟对于核化学与放射化学的发展十分重要，已经成为不可或缺的重要工具。锕系元素在溶液中以配合物离子和纳米团簇的形式存在。因此模拟锕系离子/团簇在复杂溶液化学环境中的化学行为，总结出其特有的几何/电子结构规律和物理化学特性，将对未来的环境问题有重要意义。本研究拟在经典的相对论量子化学方法基础上，结合第一性原理的从头算分子动力学模拟和机器学习方法，开发了一种自动化快速模拟锕系水团簇的拓扑结构-能量关联函数，并重点分析其第一壳层的最大水配位数。研究发现 1-4 核的 Am(III) 离子水团簇的第一壳层饱和配位水个数在 8-10、15-16、18-21 和 22-25 的范围内，其中出现概率最大的饱和配位数分别为 9(82.50%)、16(80.00%)、19(63.30%) 和 24(40.74%)。

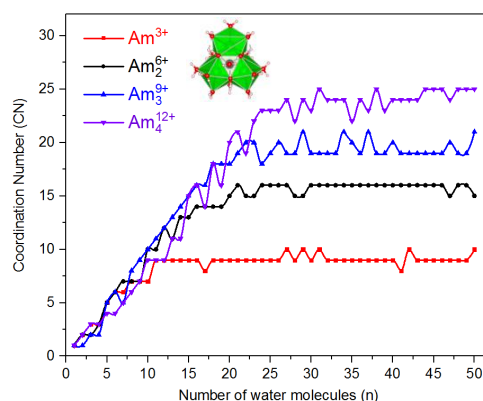


图 1. 机器学习模拟得到的  $\text{Am}_m(\text{H}_2\text{O})_n^{3m+}$  ( $m = 1-4, n = 1-50$ ) 团簇中第一配位层水个数

### 个人简介：

胡憾石，2006、2011 年先后获清华大学学士和博士学位。随后在清华大学、美国西北太平洋国家实验室和英国曼彻斯特大学从事博士后研究工作 2017 加入清华大学化学系，任准聘副教授。其主要研究方向为重元素尤其镅系元素体系的相对论量子化学理论模拟研究。



## 报告题目：锆合金腐蚀的第一性原理研究：从初始氧化到氧化膜性质

报告人：谢耀平  
上海大学 [ypxie@shu.edu.cn](mailto:ypxie@shu.edu.cn)

### 摘要：

锆合金是目前广泛使用的压水堆核燃料包壳材料，耐腐蚀性能是决定该材料服役寿命的重要因素。利用第一性原理从原子层次揭示锆合金腐蚀机理，对设计新型高性能锆合金起着非常重要的作用。本次报告主要介绍锆合金初始氧化的基本特征，从而理解实际锆合金以(0001)面为主的表面具有更为优异的耐腐蚀性能的物理根源。进而，探讨 Sn 和 Nb 对锆合金耐腐蚀性能的影响，揭示了 Sn 和 Nb 通过改变晶界强度，改变腐蚀转折点从而影响腐蚀性能的重要机理。最后，讨论通过第一性原理辅助设计锆合金的思路。

### 参考文献：

- [1] 张海辉, 李晓娣, 谢耀平\*, 胡丽娟, 姚美意, 含 Nb 或 Ge 的锆合金表面氧吸附行为的第一性原理研究. 物理学报, 2016. **65**(09): p. 280-287.
- [2] H.-H. Zhang, Y.-P. Xie\*, M.-Y. Yao, J.-X. Xu, J.-L. Zhang, L.-J. Hu, *Effects of oxygen chemical potential on the anisotropy of the adsorption properties of Zr surfaces*. Physical Chemistry Chemical Physics, 2018. **20**(21): p. 14410-14419.
- [3] R. Yuan, Y.-P. Xie\*, T. Li, C.-H. Xu, M.-Y. Yao, J.-X. Xu, H.-B. Guo, B.-X. Zhou, *An origin of corrosion resistance changes of Zr alloys: effects of Sn and Nb on grain boundary strength of surface oxide*. Acta Materialia, 2021. **209**.116804.

### 个人简介：

现任上海大学副研究员。研究内容包括利用基于密度泛函理论计算分子动力学、人工智能算法的多尺度计算方法，研究核材料、固态相变、镁合金等。已经发表论文三十余篇，包括 J. Am. Chem. Soc. (1 篇, Altmetric: 45), Acta Mater.(2 篇), Scripta Mater. (1 篇)。通过高通量计算，揭示了石墨到金刚石相变机理，并得到国内外广泛关注。该成果被 Phys.org 做了题为《Scientists solve puzzle of turning graphite into diamond》的报道；被我国《物理化学学报》列为亮点工作。曾发展了一套预测合金元素添加对镁合金时效强化效果影响的研究策略，一套预测合金元素影响锆合金腐蚀机理的研究策略。



## 报告题目：钙钛矿光生电荷动力学

报告人：龙闰

北京师范大学 [runlong@bnu.edu.cn](mailto:runlong@bnu.edu.cn)

### 摘要：

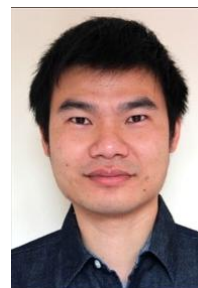
非辐射电子-空穴复合是电荷和能量损失的重要途径，是影响钙钛矿材料光电性能的重要因素。我们采用组合非绝热动力学和含时密度泛函理论，在原子尺度模拟了众多时间分辨的光谱实验，重点考察了缺陷、掺杂、晶界、湿度、化学键等多种实际因素对无机-有机杂化钙钛矿材料光生电荷动力学的影响，<sup>[1-9]</sup>预测的电荷和能量转移、弛豫过程变化起源于电荷局域复杂相互作用、捕获、弹性与非弹性电声相互作用以及晶格热紊乱。获得的动力学详细信息可以为设计高性能的钙钛矿太阳能电池提供理论指导。

### 参考文献：

- [1] J. L. He, R. Long et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141: 5798.
- [2] J. L. He, R. Long et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142: 14464.
- [3] J. L. He, R. Long et al. *Chem. Sci.* 2019, 10: 10079.
- [4] J. L. He, R. Long et al. *ACS Energy Lett.* 2018, 3: 2070.
- [5] Z. S. Zhang, R. Long et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141: 15557.
- [6] Z. S. Zhang, R. Long et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139: 17327.
- [7] L. Qiao, R. Long et al. *Angew. Chem. Int. Chem.* 2020, 59: 4884.
- [8] L. Qiao, R. Long et al. *Angew. Chem. Int. Chem.* 2020, 59: 13347.
- [9] L. Qiao, R. Long et al. *ACS Energy Lett.* 2020, 5: 3813.

### 个人简介：

龙闰，北京师范大学教授。2008年于山东大学获得原子与分子物理博士学位。2008-2010年在都柏林大学学院从事博士后研究；2010-2012年罗切斯特大学玛丽居里研究员；2012年获得爱尔兰自然科学基金委员会优秀青年基金，任职都柏林大学物理学院讲师；2015年进入北京师范大学化学学院工作。目前主要研究兴趣集中在量子-经典混合动力学方法发展及其在光电转换材料中的应用。



**报告题目: Unconventional untrahigh piezoelectricity in two-dimensional mixed-valence ferroelectrics and hydrogen-bonded ferroelectrics**

**报告人: 吴梦昊**

华中科技大学 [wmh1987@hust.edu.cn](mailto:wmh1987@hust.edu.cn)

**摘要:**

We show first-principles evidence that  $\text{Sn}_2\text{S}_3$  monolayer with degenerate mixed-valence bi-states possesses a room-temperature robust vertical polarization higher than 10 pC/m, which can be switched via interchange of oxidation states between two layers either by applying an electric field or mechanical bending. If such  $\text{Sn}_2\text{S}_3$  monolayer is utilized as a nanogenerator, an unprecedented alternating voltage of  $\sim 130\text{V}$  can be generated by applying an oscillating driving force that repeatedly reverses its polarization. Moreover, it possesses multiple metastable phases with distinct electronic properties. Due to the small energy difference between polar and nonpolar states with distinct thicknesses, akin to morphotropic phases, an unprecedented piezoelectric coefficient ( $>2700$  pm/V) can be obtained in the phase transformation under pressure, which can be further greatly enhanced via critical doping. We also propose another new approach to obtain ultra-high piezoelectric coefficients in many hydrogen-bonded ferroelectrics (e.g., organic PhMDA). Owing to the specific features of hydrogen bonding, their proton hopping barrier will drastically increase with prolonged proton transfer distance, while their hydrogen-bonded network can be easily compressed or stretched due to softness of hydrogen bonds. Their barriers as well as the Curie temperature can be approximately doubled upon a tensile strain as low as 2 %. Their Curie temperature can be tuned exactly to room-temperature by fixing a strain in one direction, and in another direction, an ultra-high piezoelectric coefficient of 2058 pC/N can be obtained.

**个人简介:**

吴梦昊于 2007 年毕业于南京大学获得学士学位, 2011 年毕业于内布拉斯加大学林肯分校获得博士学位, 之后三年分别在弗吉尼亚联邦大学和麻省理工学院从事博士后研究, 2014 年底加入华中科技大学物理学院成为教授。研究主要关注二维铁电/铁弹/多铁, 是首批涉足该领域的学者, 已有一系列关于二维铁电的预测得到实验证实, 尤其是提出的滑移铁电理论已被证实适用于多个二维材料体系。目前以第一/通讯作者在 Nature Communications、National Science Review、JACS、Nano Letters 等期刊发表文章 50 余篇。





## 报告题目：二维拓扑量子材料的理论设计及其外场调控

报告人：王锐

重庆大学 [rwang@cqu.edu.cn](mailto:rwang@cqu.edu.cn)

### 摘要：

Topological materials highlight the novel phase of matter, in which interplay between symmetry and topology leads to new understanding in condensed matter physics. Here, by a combination of first-principles calculations and symmetry arguments, we share our recent typical results on two-dimensional topological materials, such as valley Dirac phonons,<sup>[1, 2]</sup> quantum anomalous Hall effects induced by proximity<sup>[3]</sup> and Coulomb correlations.<sup>[4]</sup> In addition, the interplay between external fields and matter attracts tremendous interest for exploring novel topological quantum states. Therefore, we will further share some results on external fields-induced valley quantum anomalous Hall states.

### 参考文献：

- [1] *Phys. Rev. Lett.* 124, 105303 (2020)
- [2] *Nano Lett.* 2018, 18, 7755–7760 (2018)
- [3] *Phys. Rev. B* 98, 245127 (2018)
- [4] *Phys. Rev. B* 101, 161108 (2020) (Rapid)

### 个人简介：

王锐，重庆大学物理学院教授，博士生导师。2003年至2012年在重庆大学学习，获得学士、硕士、博士学位。2012年博士毕业留校任教，历任讲师、副教授、教授；2017-2018年南方科技大学物理系访问学者。研究兴趣主要集中在计算凝聚态物理、拓扑半金属、磁性拓扑材料、拓扑声子等相关领域；采用密度泛函理论和有效模型分析在拓扑电子材料的理论设计与外场响应、拓扑声子材料等凝聚态物理领域开展了一系列工作，研究结果在 *Phys. Rev. Lett.*、*Nano Lett.*、*Phys. Rev. B* 等期刊发表第一作者或通讯作者论文 40 余篇，担任 *Phys. Rev. Lett.*、*Nature Commun.* 等期刊审稿人，主持国家自然科学基金项目 3 项、重庆市自然科学基金项目 1 项；2010 年获得教育部博士学术新人奖、2018 年入选重庆大学后备拔尖人才、2019 年入选重庆市青年拔尖人才。



## 报告题目：二维“半”负泊松比材料的第一性原理预测

报告人：马风仙

河北师范大学 [fengxianma@hebtu.edu.cn](mailto:fengxianma@hebtu.edu.cn)

### 摘要：

一般来讲，当沿着纵向拉伸/压缩材料时，其横向晶格会收缩/扩张，这类材料在自然界最为常见，其泊松系数为正。近年来，具有负泊松比的二维材料引起人们广泛关注<sup>[1]</sup>。与普通材料不同，负泊松比材料在纵向拉伸/压缩时，在横向会产生反常的晶格扩张/收缩行为。目前已经报道的具有负泊松比的二维材料可简单归类为面内负泊松比材料、面外负泊松比材料以及双轴负泊松比材料。除以上三类之外，在应力作用下二维材料中是否存在其它种类的晶格响应行为值得细致探讨。

在众多二维材料中，二维硼基材料由于其结构的多样性备受关注<sup>[2]</sup>。由于硼原子外层只有三个电子，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  $sp^2$  成键态。如何提高硼单层稳定性以及探索其潜在的优异性能一直是对该类材料的重点研究方向之一。我们通过第一性原理计算结合晶体结构预测方法，发现了通过 Pd 元素修饰的硼烯可以形成稳定的二维结构。一种全新的 PdB4 单层及其新颖机械特性得以报道<sup>[3]</sup>。PdB4 单层不论受到纵向拉伸或压缩，在其横向均产生晶格扩张行为。这一特性不同以往报道的负泊松系数材料，我们将其命名为“半”负泊松比材料。该类材料将在纳米装甲等领域具有潜在应用价值。

### 参考文献：

- [1] Jin-Wu Jiang, Harold S. Park, *Nat. Commun.* 2014, 5, 4727
- [2] Fengxian Ma, Yalong Jiao, Guoping Gao, Yuantong Gu, Ante Bilic, Zhongfang Chen, Aijun Du, *Nano Lett.* 2016, 16, 3022-3028
- [3] Fengxian Ma, Yalong Jiao, Weikang Wu, Ying Liu, Shengyuan A. Yang, and Thomas Heine, *Nano Lett.* 2021, 21, 2356-2362

### 个人简介：

马风仙，2017 年于昆士兰科技大学获得博士学位，现为河北师范大学物理学院副教授。入选河北省“百人计划”，目前在 *Nano Lett.*, *PRL*, *Angew. Chem.* 等期刊发表论文 40 余篇，主持国家自然科学基金两项，省级基金一项。主要研究方向：基于第一性原理计算研究低维材料的结构，电子及力学性质。



## 报告题目: Tunable bending modulus of graphene oxide

报告人: 刘立钊

大连理工大学 [lizhao\\_liu@dlut.edu.cn](mailto:lizhao_liu@dlut.edu.cn)

### 摘要:

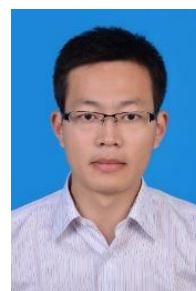
Graphene is highly flexible and widely used in flexible devices. However, is graphene oxide more flexible than graphene? This is a long still under-debate question between simulations and experiments. Employing density functional theory calculations, we show that the bending modulus of graphene oxide is quite tunable by changing the type and coverage of the functional groups, as well as the bending direction. The hydroxyl increases the bending modulus of graphene, but epoxide can degrade the bending modulus in armchair bending direction, making the graphene oxide more flexible than graphene. On the other hand, the bending modulus of graphene oxide can be further degraded by tensile strain. Generally, our results demonstrate the tunable flexibility of graphene oxide, which should be helpful to design the graphene-based flexible devices.

### 参考文献

- [1] L. Liu et al., *Nanoscale*, 2020, **12**, 1623.
- [2] A. Incze et al., *Phys. Rev. B*, 2004, **70**, 212103.
- [3] P. Poulin et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 2016, **113**, 11088–11093.

### 个人简介:

刘立钊, 大连理工大学物理学院副教授, 2014 年于大连理工大学凝聚态物理专业取得博士学位, 2017 年晋升为副教授。主要研究领域为低维纳米材料的结构设计和物性模拟, 在 *Nano Lett.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, *J Mater. Chem. C*, *Nanoscale* 等期刊发表 SCI 收录论文近 30 篇, 先后主持国家自然科学基金等项目, 获教育部自然科学二等奖 1 项。



## 报告题目：插层构筑设计二维材料家族 $MA_2Z_4$ ：具有拓扑、 磁性和超导等特性

报告人：王磊

中国科学院金属研究所 [lwang16b@imr.ac.cn](mailto:lwang16b@imr.ac.cn)

### 摘要：

近年来，具有丰富电子性质的二维单层材料引起了越来越多的研究兴趣。本文中，我们提出了一种构建七原子层结构单层  $MA_2Z_4$  的方法，我们称之为插层构筑方法。该方法是通过将  $MoS_2$  型单层  $MZ_2$  插入  $InSe$  型单层  $A_2Z_2$  中从而实现  $MA_2Z_4$  单层的构造。我们通过第一性原理计算方法对这种独特的策略进行了进一步的解释，计算结果不仅重现了已经在实验上合成的  $MoSi_2N_4$  和  $MnBi_2Te_4$  两种材料，而且还预测了 72 种热力学和动力学稳定的化合物。此外，我们发现在这种插层构筑的  $MA_2Z_4$  单层中显著地重构了其组成单元  $MZ_2$  和  $A_2Z_2$  的能带结构，使其显现出丰富的电子性质，并且这些材料的电子性质可以根据系统价电子总数对其进行分类。具有 32 和 34 价电子的系统主要是半导体；具有 33 价电子的系统是非磁性金属或铁磁性半导体。此外，在预测的化合物中我们还揭示了无论是使用标准密度泛函理论计算还是使用杂化泛函计算， $(Ca, Sr)Ga_2Te_4$  都是非平庸的拓扑材料。 $VSi_2P_4$  是铁磁半导体材料，而  $TaSi_2N_4$  是 I 型 Ising 超导体材料。此外， $WSi_2P_4$  是具有独特的自旋谷特性的直接带隙半导体，其具有抵抗层间相互作用的能力。在该工作中，我们的研究提供了一种设计新奇电子特性的七原子层  $MA_2Z_4$  的有效方法，为新型二维材料的设计提供了思路。

### 参考文献：

- [1] Wang, L., Shi, Y., Liu, M., Zhang, A., Hong, Y.-L., Li, R., Gao, Q., Chen, M., Ren, W., Cheng, H.-M., Li, Y., Chen, X.-Q., Intercalated architecture of  $MA_2Z_4$  family layered van der Waals materials with emerging topological, magnetic and superconducting properties. *Nat Commun* **12**, 2361 (2021).
- [2] Hong, Y.-L., Liu, Z., Wang, L., Zhou, T., Ma, W., Xu, C., Feng, S., Chen, L., Chen, M.-L., Sun, D.-M., Chen, X.-Q., Cheng, H.-M., Ren, W. Chemical vapor deposition of layered two-dimensional  $MoSi_2N_4$  materials. *Science* **369**, 670–674 (2020).

### 个人简介：

王磊，现为中国科学技术大学材料科学与工程学院（中国科学院金属研究所）博士研究生，师从陈星秋研究员。主要研究兴趣为新型二维材料设计及物性探究以及拓扑电子材料的设计与计算。目前主要研究  $MA_2Z_4$  家族二维材料中的新物性。在 *Nature Communications*, *Science*（共同第一作者），*Physical Review Materials*（共同第一作者）等期刊发表论文。



## 报告题目：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

报告人：敖志敏

广东工业大学 [zhimin.ao@gdut.edu.cn](mailto:zhimin.ao@gdut.edu.cn)

### 摘要：

理论化学计算在研究污染控制过程中的表界面行为的微观过程具有巨大的优势，能够呈现过程中的微观细节。本研究中，我们主要利用理论化学计算方法来研究通过高级氧化方法来处理挥发性有机物（VOCs）的微观过程，主要关注光催化高级氧化过程和过硫酸盐高级氧化过程。在实验中有比较成熟的方法和流程来评价光催化剂降解污染物的过程，然而在理论化学计算中，还没有比较系统的流程来评估光催化降解污染物的性能。针对该问题，我们系统地①能带结构、价导带位置以及光吸附利用率，以此判断光生电子空穴对效率；②对水、氧气以及其他氧化物的吸附性能，判断活性基团的生成情况；③对污染物的吸附能力；④降解污染物的反应路径，得出降解性能；几个方面来评价催化剂氧化降解 VOCs 的性能。并采用 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> dots/graphene 和 g-CN/M<sub>2</sub>CO<sub>2</sub> (M = Hf、Zr 和 Sc) 来验证该流程的有效性。另外一方面，我们从化学的角度也探索了以单壁碳纳米管（SWCNT）做为催化剂，通过喷淋过硫酸盐溶液的方法以处理 VOCs 的可能性。从过硫酸盐吸附、激活，VOCs 分子吸附及自由基基团攻击降解等方面来研究其氧化降解过程。研究发现 SWCNT/过硫酸盐氧化体系能够高效的氧化降解 VOCs 且能抑制 CO 副产物的产生。

### 参考文献：

- [1] Junhui Zhou, Didi Li, Weina Zhao, Binghua Jing, Zhimin Ao\* and Taicheng An, First-principles evaluation of VOCs degradation in Z-scheme photocatalytic systems: MXene and graphitic-CN heterostructures, *ACS Applied Materials & Interfaces* 13 (2021) 23843-23852 (\*Corresponding author).
- [2] Zhenhua Dai, Didi Li, Zhimin Ao\*, Shaobin Wang, Taicheng An, Theoretical Exploration of VOCs Removal Mechanism by Carbon Nanotubes Through Persulfate Based Advanced Oxidation Processes: Adsorption and Catalytical Oxidation, *Journal of Hazardous Materials* 405 (2021) 124684 (\*Corresponding author).
- [3] Binghua Jing, Zhimin Ao\*, Weina Zhao, Ying Xu, Zhongfang Chen, Taicheng An, Evaluation procedure of photocatalysts for VOCs degradation from the view of density functional theory calculations: g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> dots/graphene as an example, *Journal of Materials Chemistry A*. 8 (2020) 20363-20372. (\*Corresponding author, outside back cover)
- [4] Teng Wang<sup>#</sup>, Chunyang Nie<sup>#</sup>, Zhimin Ao\*, Shaobin Wang, Taicheng An, Recent progress in g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> quantum dots: synthesis, properties and applications in photocatalytic degradation of organic pollutants, *Journal of Materials Chemistry A* 8 (2020) 485. (\*Corresponding author).

### 个人简介：

敖志敏，博士，教授，博士生导师。毕业于吉林大学，现任职于广东工业大学环境科学与工程学院。国家海外引进高层次青年人才，广东工业大学“百人计划”特聘教授。主要从事环境污染控制过程中表/界面吸附、催化行为及催化机理研究等。目前在 *Matter*, *Adv. Funct. Matter.*, *ACS Nano*, *Environ. Sci. Technol*, *Water Res.*, *ACS Catal.* 和 *Appl. Catal. B Environ.* 等环境、化学和材料领域国际期刊上已发表 SCI 论文 150 余篇，其中第一和通讯作者 80 余篇，引用 6300 余次，H = 38，担任 *Frontiers in Nanotechnology* Associated Editor, *Chinese Chemical Letters*, *Frontiers in Physical Chemistry* 等 6 个国际杂志编委，*Nature Comm.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Adv. Mater.*, *Angew.*, *Mater. Horizon* 等 60 多个国际 SCI 学术刊物审稿人。





# 报告题目：恒电势条件下电催化反应活性的理论预测与动力学模拟

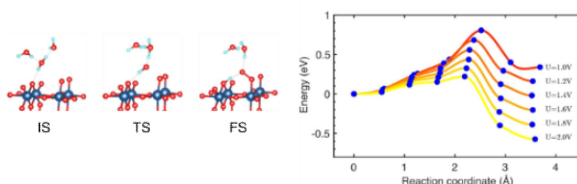
报告人：段志遥

西北工业大学 zhiyaoduan\_npu@163.com

## 摘要：

电催化反应是新能源催化转化的核心过程。近年来，第一性原理计算在电催化反应的机理解析、活性预测、材料设计等方面发挥了重要的作用。在电催化反应活性的理论预测中，Norskov 等人发展的计算氢电极方法得到了广泛的应用。但是，该方法忽略了电催化反应所采用的恒电势反应条件，可能造成预测的不准确。具体而言，计算氢电极方法保持体系内电子数不变，而反应前后体系的功函数如有显著改变，则会导致反应前后体系所处的电势不同。而在恒电势条件下，体系则会通过调整反应前后体系内的电子数，使功函数在反应前后保持一致。而反应前后体系电子数差所造成的能量差： $\Delta nU$ ，则是恒电势条件下反应能不能忽视的组成部分。近年来，我们发展了恒电势下第一性原理的计算方法，对电催化反应中一系列问题进行了深入的研究和探讨：（1）pH 依赖的电催化反应活性。<sup>[1-3]</sup>（2）单原子催化剂 CoN<sub>4</sub> 在外电压下的自旋转变。<sup>[4]</sup>（3）电势依赖的能垒计算。<sup>[5]</sup> 我们发现恒电势计算可以解决传统计算氢电极方法所不能解决的问题。而恒电势能垒计算对揭示电催化反应的机理具有重要意义。

图 1. RuO<sub>2</sub> (110) 面上析氧反应中的 O-O 成键反应能垒随电压的变化



## 参考文献：

- [1] Z. Duan, G. Henkelman\*, Theoretical resolution of the exceptional oxygen reduction activity of Au (100) in alkaline media, *ACS Catal.* 2019, 9, 6, 5567–5573.
- [2] Z. Duan, G. Henkelman\*, Identification of Active Sites of Pure and Nitrogen-Doped Carbon Materials for Oxygen Reduction Reaction Using Constant-Potential Calculations, *J. Phys. Chem. C* 2020, 124, 22, 12016–12023.
- [3] Q. Zhang#, Z. Duan#\*, Y. Wang, L. Li\*, B. Nan and J. Guan\*, Atomically dispersed iridium catalysts for multifunctional electrocatalysis, *J. Mater. Chem. A*, 2020, 8, 19665-19673.
- [4] Z. Duan, G. Henkelman\*, Surface Charge and Electrostatic Spin Crossover Effects in CoN<sub>4</sub> Electrocatalysts, *ACS Catal.* 2020, 10, 12148–12155.
- [5] Z. Duan#\*, P. Xiao#\*, Simulation of Potential-Dependent Activation Energies in Electrocatalysis: Mechanism of O–O Bond Formation on RuO<sub>2</sub>, *J. Phys. Chem. C*, accepted.

## 个人简介：

段志遥 2006 年毕业于武汉大学应用物理专业，2013 年获美国匹兹堡大学材料科学博士，毕业后在美国得克萨斯大学奥斯汀分校进行博士后研究，2021 年加入西北工业大学材料系。段志遥致力于催化材料的计算模拟研究，在合金纳米颗粒构效的预测、电催化反应机理、电化学腐蚀、与金属/氧化物界面协同效应等问题上进行了深入的理论研究。近年来，段志遥着力开展了在恒电势条件下电催化反应机理的研究，并在 pH 依赖反应活性的微观机制、外电压导致的单原子催化剂自旋交叉效应、与燃料电池中铂氧还原催化剂溶解机理等电催化问题上有所建树。欲了解更多段志遥的科研工作请前往 <http://jszy.nwpu.edu.cn/2021010077>。





## 报告题目：金属纳米粒子生长动力学理论

报告人：胡素磊

中国科学技术大学 [husulei@163.com](mailto:husulei@163.com)

### 摘要：

我们推导了包含金属与载体相互作用效应的负载粒子扩散系数公式，发展了描述负载粒子迁移与碰撞熟化动力学的模拟算法，建立了描述负载金属纳米粒子扩散的一般性理论方法，这些理论结果得到了基于神经网络势函数的分子动力学模拟方法验证。我们通过理论推导和对 1610 个熟化动力学曲线的回归学习，发现负载粒子熟化生长动力学的幂指数与纳米粒子中原子的化学势存在一个线性标度关系，即对于纳米量级的粒子，其熟化动力学的规律系统性地偏离经典的 Lifshitz-Slyozov-Wagner (LSW) 理论的预言。这得到了近期的纳米量级高分辨电镜直接观察结果的证明。我们使用第一性原理密度泛函理论和基于神经网络势函数的分子动力学模拟计算，研究了气氛压力依赖的纳米粒子的能量学和长期生长动力学的关系，为在催化工况条件下揭示负载金属纳米催化剂的能量学提供了理论依据，基于此，我们建立了稳健纳米材料理性设计和筛选理论。

### 参考文献：

- [1] Yao, Y.C.#; Hu, S.L.#; Chen, W.X.#; Li, W.X.\*; Wu, Y.E.\*; et al., *Nat. Catal.*, 2019, 2:304.
- [2] Hu, S.L.; Li, W.X.\*; *Sci. China Tech. Sci.*, 2019, 62:762.
- [3] Hu, S.L.; Li, W.X.\*; *ChemNanoMat*, 2018, 4:510.
- [4] Hu, S.L.; Li, W.X.\*; *ChemCatChem*, 2018, 10:2900.
- [5] Hu, S.L.#; Ouyang, R.H.#; Li, W.X.\*; *J. Energy Chem.*, 2018, 30:108.
- [6] Wan, Q.X.#; Hu, S.L.#; Dai, J.N.; Chen, C.Q.\*; Li, W.X.\*; *J. Phys. Chem. C*, 2018, 123:1160.
- [7] Wan, Q.X.#; Hu, S.L.#; Dai, J.N.; Chen, C.Q.\*; Li, W.X.\*; *J. Phys. Chem. C*, 2019, 123:11020.
- [8] Yin, P.#; Hu, S.L.#; Lin, Y.\*; Li, W.X.\*; Liang, H.W.\*; et al., *Nat. Commun.*, 2021, accepted.
- [9] Hu, S.L.; Li, W.X.\*; 2021, under revision.

### 个人简介：

胡素磊，中国科学技术大学特任副研究员，主要研究领域为纳米材料生长动力学理论：发展了描述负载金属纳米粒子扩散的一般性理论方法，揭示了决定纳米催化剂早期熟化动力学的一般性标度关系，发现了金属与载体相互作用对负载纳米材料生长动力学的 Sabatier 原理。先后获得中国科学技术大学创新基金资助，微尺度物质科学国家研究中心优秀博士后资助，博士后科学基金一等资助和特别资助，国家自然科学基金青年基金资助。



## 报告题目：仿生[NiFe]氢化酶催化质子还原反应机制的理论研究

报告人：汤浩

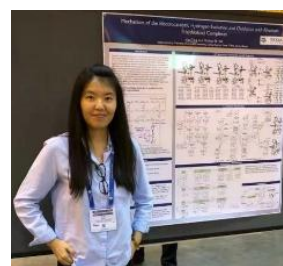
温州大学 [postdocth@126.com](mailto:postdocth@126.com)

### 摘要：

氢化酶是存在于自然界厌氧微生物体内的一种金属酶，它能可逆地催化氢分子的氧化与生成。氢化酶的发现和研究在制氢领域具有广泛的应用前景，研究者寄希望于合成类似天然氢化酶结构和功能的氢化酶模型物，通过光作用产生氢能源。2016年，实验科学家报道了迄今为止首例在结构和功能上均与天然[NiFe]氢化酶相似的仿生[NiFe]氢化酶 (Nat. Chem. 2016, 8, 1054)，此模型物的质子还原反应是以镍为活性中心。这一重大突破为设计合成仿生[NiFe]氢化酶开辟了新的思路并受到广泛关注。其中关于[NiFe]氢化酶模型物的质子还原机理，文章提出了类似天然[NiFe]氢化酶的“双电子双氢”机制，然而，我们通过详细计算和比较所有可能发生的质子还原反应路径，提出了能量更低的“三电子二氢”机制，即 E[ECEC] (E: 电子转移, C: 化学反应)，其中第一个电子转移为活化步骤，第二和第三个电子转移则帮助实现了析氢反应催化循环。文章得出质子还原反应是以镍为活性中心的结论仅仅基于通过密度泛函理论 (DFT) 优化的氢配体以末端氢的形式存在镍位点上的几何结构，而我们通过计算和分析各个质子化位点的热力学数据，如镍位点末端氢、铁位点末端氢、桥氢形式连接镍和铁原子等，最终发现了氢配体在最稳定的单氢化合物 (Ni-R) 结构中是以氢桥形式连接镍和铁原子但同时氢位置更偏向于铁，进而明确了其催化反应活性中心是在铁上，而非文章报道的镍上。还揭示了硫醇盐的半配位效应导致铁硫键断裂而产生的末端硫醇盐可以作为质子穿梭位点，是[NiFe]氢化酶模型物催化质子还原反应的重要特征。

### 个人简介：

汤浩，硕博连读毕业于吉林大学理论化学研究所，导师为中国科学院孙家钟院士和黄旭日教授。读博期间在中国科学院化学所光化学实验室中国科学院姚建年院士和陈辉研究员课题组联合培养1年。博士毕业后，赴美国 Texas A&M University 化学系从事近7年的博士后研究工作，合作导师为 Michael B. Hall。自2021年4月起担任温州大学化学与材料工程学院正教授。从2009年起开始从事理论化学计算研究，主要研究领域包括无机电催化、有机过渡



金属催化、仿生酶催化机理领域的理论与计算研究。近年来已在仿生镍铁氢化酶质子还原机理、复杂过渡金属复合物电子结构分析及其氢气氧化和析氢反应机制等氢能源研究方面取得了一些创新性成果，得到了国内外同行的认可和好评。主要包括 (1) 重新论证了首例在结构和功能上均与镍铁氢化酶相似的仿生镍铁氢化酶的质子还原机理，揭示了其反应活性中心是铁不是镍；(2) 首次运用高精度多组态方法解决了单参考态密度泛函理论 (DFT) 不能解决的复杂过渡金属复合物的电子结构问题；(3) 明确了含有非清晰 (non-innocent) 配体配位的过渡金属复合物进行氢气氧化和析氢反应机制。研究成果发表在国际期刊杂志上如 J. Am. Chem. Soc.、ACS Catalysis、Inorganic Chemistry、J. Org. Chem.、Dalton Transactions、Physical Chemistry Chemical Physics、Journal of Computational Chemistry 等，其中一篇 JACS 入选 ESI 高被引论文。参与的科研项目经费总计超过 139 万美元。曾参加了多次美国化学会年会和美国高登学术会议等国际学术会议并做了相关工作报告。

**报告题目: Metal synergistic effects on CO<sub>2</sub> reduction over bimetallic electrocatalysts**

**报告人: 赵忠龙**

内蒙古大学 [zlzhao@imu.edu.cn](mailto:zlzhao@imu.edu.cn)

**摘要:**

The electrochemical reduction of CO<sub>2</sub> into chemicals and fuels using intermittent renewable sources such as wind, hydro, and solar represents one of the most attractive means to achieve a zero-carbon footprint and the storage of these renewable sources. Metal electrocatalysts based on Cu, Ag, Au, and Pd have been widely explored and proved valuable for CO<sub>2</sub> reduction. However, most of them suffer from sluggish kinetics, poor product selectivity, and competitive hydrogen evolution. In this report, I will introduce our recent works on the designing of near-surface alloys, two-dimensional bimetallics, and metal monolayer electrocatalysts for CO<sub>2</sub> reduction from density functional theory calculations.<sup>[1-3]</sup> We proposed several highly active and selective catalysts which are promising for formic acid, carbon monoxide, methanol, and ethylene production, while simultaneously suppressing the competing hydrogen evolution reaction. We found that the scaling relations of the binding energy of intermediates can be decoupled due to the synergistic effects between the host and solute in different configurations, thus opens a new dimension for catalyst design and demonstrate the great potential of metal catalysts by modulating their near-surface properties.

**参考文献:**

- [1] Zhao, Z.; Lu G. Computational Screening of Near-Surface Alloys for CO<sub>2</sub> Electroreduction. *ACS Catal.* 2018, 8, 3885-3894.
- [2] Luo, M.; Zhao, Z.; Zhang Y.; Sun Y. et al. PdMo Bimetallic for Oxygen Reduction Catalysis. *Nature* 2019, 574, 81-85.
- [3] Zhao, Z.; Lu G. Bimetallics for Selective Electrocatalytic Conversion of CO<sub>2</sub>: A First-Principles Study, *J. Mater. Chem. A* 2020,8, 12457-12462.

**个人简介:**

赵忠龙, 博士, 副研究员, 内蒙古大学物理科学与技术学院教师。2015年博士毕业于吉林大学超硬材料国家重点实验室, 师从崔田教授。2015-2019年间在美国加州州立大学北岭分校从事博士后研究工作, 导师Gang Lu教授。主要从事功能材料设计、金属纳米催化、二氧化碳电还原等方向的理论模拟研究工作。以第一作者或共同第一作者身份在 *Adv. Mater.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*Nano Lett.*、*Adv. Energy Mater.*、*ACS Catal.*、*J. Mater. Chem. A*、*Phys. Rev. B* 等期刊发表论文 17 篇, 总引用 1400 余次。



## 报告题目：复杂应变下金刚石的力学行为与电子传导特性

报告人：刘畅

吉林大学 [liuchang127@jlu.edu.cn](mailto:liuchang127@jlu.edu.cn)

### 摘要：

金刚石是众所周知的超硬、超脆、超宽禁带半导体材料。在通常的负载条件（如单轴拉伸或者纯剪切）下，随着应变的增加表现为陡峭的应力响应以及突发的晶面解理。<sup>[1]</sup> 然而，我们的理论工作揭示在引入压缩限制后，金刚石由于碳键的过度伸长而解离的模式被抑制，取而代之的是晶体结构通过键角的变化释放应变带来的能量增长。巨大的键角变化产生了局部的化学键重组，进而促使金刚石产生了反常规的大幅弹性形变，并创造了相应的电荷流动通道，在很大的应变范围内产生了金属性的金刚石。<sup>[2]</sup> 逐渐加大的压缩-剪切形变诱发了纯净金刚石的电导增强和晶格软化，从而在很大的库仑赝势 $\mu^*=0.15\sim 0.05$  范围内产生了无需外部引入载流子的声子诱导的超导电性，超导转变温度  $T_c$  为 2.4~12.4 K。<sup>[3]</sup> 奇异结构延展性、电子传导性和超导特性，极大丰富了金刚石的内涵属性，也改变了人们对超硬材料的传统认知。此外，上述工作还为寻找非传统超导体提供了新思路，我们最近的理论工作还在对高科技举足轻重的半导体材料，硅、碳化硅中发现了内涵的超导态。所得结果可望拓展新奇超导材料的种类和特性范畴，促进新型可控半导体-超导体共存材料的研发与应用。

### 参考文献：

- [1] R. H. Telling, C. J. Pickard, M. C. Payne, and J. E. Field, Theoretical Strength and Cleavage of Diamond, *Phys. Rev. Lett.* 84, 5160 (2000).
- [2] Chang Liu, Xianqi Song, Quan Li, Yanming Ma, and Changfeng Chen, Smooth Flow in Diamond: Atomistic Ductility and Electronic Conductivity, *Phys. Rev. Lett.* 123, 195504 (2019).
- [3] Chang Liu, Xianqi Song, Quan Li, Yanming Ma, and Changfeng Chen, Superconductivity in Compression-Shear Deformed Diamond, *Phys. Rev. Lett.* 124, 147001 (2020).

### 个人简介：

刘畅，2020年6月于吉林大学获博士学位，现为吉林大学“鼎新学者”博士后。主要从事复杂应变下材料的结构与物性研究，探索应变条件下新奇材料形态和物理现象，包括结构形变与相变、应力响应行为、电子传导性质、超导电性，以及相关微观机制，如电子结构、晶格动力学、电声耦合性质的演变。已在 *Phys. Rev. Lett.*, *Nat. Commun.*, *Acta Mater.*, *Phys. Rev. B*, *J. Phys. Chem. Lett.*, *Sens. Actuators B* 等刊物发表 SCI 论文 20 篇，其中作为第一作者发表 *Phys. Rev. Lett.* 两篇，*Chin. Phys. Lett.* (Express Letter) 和 *Phys. Chem. Chem. Phys.* 各一篇，作为共同第一作者发表 *J. Phys. Chem. Lett.* 一篇，作为共同通讯作者发表 *Acta Mater.* 一篇。先后为 *Phys. Rev. Lett.*, *Phys. Rev. B*, *J. Appl. Phys.* 等期刊审稿。



## 报告题目：石墨烯中不同原子配位环境对单个金属活性的 调控研究

报告人：唐亚楠

郑州师范学院 [yntang2010@163.com](mailto:yntang2010@163.com)

### 摘要：

化石燃料燃烧、化学工业以及车辆尾气中会排放出大量一氧化碳(CO)、氮氧化物(NO<sub>x</sub>)等有害气体，从而对环境造成严重影响<sup>[1,2]</sup>。CO 的低温氧化在 CO<sub>2</sub> 激光器中气体的纯化、CO 气体探测器材料、呼吸用气体净化装置等方面都具有重要的使用价值。另外，NO 催化氧化技术可以避免氨注入，并在低温下实现高效去除 NO<sub>x</sub><sup>[3]</sup>。因此，如何在较低温度下实现 CO 和 NO 催化氧化已成为有效消除有害气体的重要途径。本研究通过设计石墨烯中 B<sub>x</sub> 和 N<sub>y</sub> 原子的不同配位环境(改变数量和比例,  $x + y = 0 \sim 3$ )来调控负载单个金属 Co 原子的电子结构和反应活性(B<sub>x</sub>-N<sub>y</sub>-gra-Co)。研究发现：不同配位结构中 B<sub>x</sub>-N<sub>y</sub>-Co-C 原子间电荷转移量能够有效影响气体吸附和活性势垒大小。其中，B<sub>1</sub>-gra-Co, N<sub>1</sub>-gra-Co 和 B<sub>1</sub>N<sub>1</sub>-gra-Co 稳定结构对氧化 CO 和 NO 表现高的催化活性(< 0.5 eV)。该研究成果有助于精确设计高效、低成本的石墨烯基单原子催化材料、并预测其潜在应用。

### 参考文献：

- [1] M. V. Twigg, *Appl. Catal. B: Environ.*, 2007, 70, 2-15.
- [2] M. Ackermann, T. Pedersen, B. Hendriksen, O. Robach, S. Bobaru, I. Popa, C. Quiros, H. Kim, B. Hammer, S. Ferrer and J. W. M. Frenken, *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95, 255505.
- [3] H. J. Freund, G. Meijer, M. Scheffler, R. Schlogl and M. Wolf, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2011, 50, 10064-10094.

### 个人简介：

唐亚楠博士，副教授，现任郑州师范学院物理与电子工程学院副院长。近年来，在ACS nano, J. Mater. Chem. A, Carbon, Fuel, J. Phys. Chem. C等学术期刊发表SCI论文90余篇，其中，Top期刊论文50余篇。授权国家发明专利3项。获得河南省科学技术进步奖、河南省第十四届青年科技奖等；曾主持承担国家自然科学基金、省科技攻关、省自然科学基金、省高校科技创新人才等项目10余项。研究领域：计算凝聚态物理、新型能源材料的模拟与设计研究。





## 报告题目：The Story of Contact Angles

报告人：李晖

北京化工大学 [hli@mail.buct.edu.cn](mailto:hli@mail.buct.edu.cn)

### 摘要：

接触角是用来表示固体表面浸润性的重要参量，在 200 多年前杨氏方程的提出就揭示了表面张力、表面浸润性与接触角之间的定量关系，并一直沿用至今。今年来，随着电化学技术和化学工程的发展，人们发现，传统的杨氏方程接触角在某些特殊的情况下会发生特殊的变化，因此人们对传统的浸润理论模型开始进行修正。在本报告中，我们利用分子动力学模拟，针对流动液体，提出了动态浸润模型，并对纳米气泡的浸润性进行了系统的研究，从而大大拓展了接触角的概念，为化工流动浸润和电化学反应的过电势来源进行了新的理论阐述。

### 个人简介：

李晖，北京化工大学教授。1999年本科毕业于南京大学基础学科教学强化部理科班，2008年获南京大学理论与计算化学博士学位。

2008-2009年在新加坡国立大学表面物理实验室做博士后，2009-2012年在美国内布拉斯加林肯大学化学系从事博士后工作。2012年加入中国科学院物理研究所表面物理国家重点实验室，任副研究员。2017年加入北京化工大学软物质科学与工程高精尖中心，任教授。多年来主

要从事表面物理化学过程（包括浸润、相变、自组装、气溶胶成核、异相催化等）的多尺度理论模拟，以及低维材料（硅烯、硼烯、表面合金等）生长机制的第一性原理研究。





## 报告题目：二维材料纳米结构的生长/刻蚀机理与可控制备

报告人：马亮

东南大学 [liang.ma@seu.edu.cn](mailto:liang.ma@seu.edu.cn)

### 摘要：

二维材料虽然具有许多新颖而优异的物性，但综合性能总是存在这样或那样的短板。例如，石墨烯具有超高载流子迁移率，但其零带隙特性导致的低开关比严重限制了它在微电子器件中的应用。而将石墨烯裁剪成一维纳米带，不仅能够打开适中的带隙还引入了新颖物性。因此，在纳米尺度实现二维材料结构的可控制备与性质的精准调控，对二维材料基础研究与应用具有非常重要的科学意义。一方面，二维材料生长过程涉及多种原子及复杂界面相互作用，导致可控性较差，难以实现层数、形貌、尺寸的精准控制。同时，原子尺度的二维材料在结构上的细微改变会对其性能产生显著影响。针对如何实现大面积、高质量二维材料的可控制备以及对结构/缺陷的按需构筑与调控这一关键科学问题。我们基于多尺度模拟方法，在原子尺度对二维材料及其纳米结构的生长机理与可控制备进行了深入研究，提出了切割碳纳米管、刻蚀石墨烯及六方氮化硼、台阶引导单向成核生长大面积二硫化钼等可控制备高质量二维材料及其纳米结构的设想，部分成果已获实验证实。

### 参考文献：

- [1] L. Ma, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 51, 1161 (2012)
- [2] L. Ma, et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 5, 1192 (2014)
- [3] L. Ma, et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 6, 4099 (2015)
- [4] L. Ma, et al., *Nano Lett.* 17, 3208 (2017).
- [5] L. Ma, et al., *Adv. Energy Mater.* 7, 1601731 (2017)
- [6] L. Ma\*, et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 9, 6801 (2018)
- [7] L. Ma, et al., *J. Am. Chem. Soc.* 141, 1452 (2019)
- [8] L. Ma\*, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* 11, 33231, (2019)

### 个人简介：

马亮，东南大学物理学院教授，博导。2009年本科毕业于东南大学物理系；2015年博士毕业于东南大学物理系凝聚态物理专业(硕博连续)；2015年至2018年在美国内布拉斯加大学林肯分校担任博士后研究助理；2018年11月加入东南大学物理学院。主要从事二维材料生长/刻蚀机理的多尺度模拟研究和新型二维材料的理性设计，在大面积、高质量二维材料的可控生长和刻蚀机制方面取得了系统的创新性成果，预测和设计了若干种性能优异的二维功能材料。已在包括 *Nat. Nanotechnol.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Nano Lett.*, *Adv. Energy Mater.* 等国际学术期刊上发表 SCI 论文 40 余篇，其中影响因子 >10 的 18 篇。论文引用 1500 多次，H-index 20。主持和参与了包括国家自然科学基金和国家重点研发计划子课题等多个科研项目。曾获江苏省优博论文奖和全国青年计算物理优秀青年论文奖等。



## 报告题目：动力学模拟在催化反应机理研究中的应用与发展

报告人：李磊

南方科学技术大学 [lli33@sustech.edu.cn](mailto:lli33@sustech.edu.cn)

### 摘要：

催化剂是工业生产中不可或缺的功能材料，高达 90% 的工业产品的生产离不开催化剂，弄清催化机理是发展高效催化剂的基础。然而，催化反应的复杂性为催化机理的研究带来了很大的困难。尤其，如何构造全面的反应网络成为了该领域最具挑战的一环。本报告将介绍分子动力学模拟方法在催化反应机理研究中的应用和挑战，同时，结合报告人近年来的研究成果，探讨机器学习和新的动力学模拟方法在全面反应网络构建方面的发展潜力。

### 个人简介：

李磊，南方科技大学材料科学与工程系副教授、博士生导师。本科毕业于中国科学技术大学材料科学与工程系，2016 年以最佳研究生毕业于美国内布拉斯加大学林肯分校化学系，获得博士学位，师从曾晓成教授。2016-2020 在美国德克萨斯大学奥斯汀分校 Graeme Henkelman 教授课题组从事博士后研究工作，主要专注于催化反应机理研究、纳米材料动力学行为及计算方法开发方面的工作，期间主导开发了机器学习软件 PyAMFF。迄今已发表 SCI 论文 27 篇，期刊包括 Proc. Natl. Acad. Sci. USA、J. Am. Chem. Soc.、Nano Lett.、ACS Catalysis、Adv. Sci.、Nanoscale、Chem. Commun. 等。



## 报告题目: Design and Catalytic Performance of Heptazine-Based Carbon Nitrides

报告人: 颜力楷

东北师范大学 [yanlk924@nenu.edu.cn](mailto:yanlk924@nenu.edu.cn)

### 摘要:

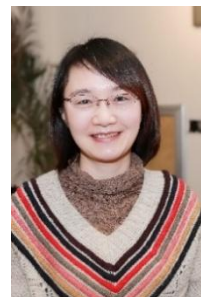
The heptazine ring is an ideal building block for the construction of porous materials, which has attractive application prospects in the fields of photocatalysis and electrode materials. A series of carbon nitrides were designed by introducing the connected bridges of azo, benzene, biphenyl and C-C, C-C≡C-C, C<sub>3</sub>N<sub>3</sub> units. These carbon nitrides as photocatalysts for CO<sub>2</sub> reduction were investigated by density functional theory calculations. Compared to g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, the band gaps of designed carbon nitrides decrease and the highest occupied molecular orbitals (HOMOs) and lowest unoccupied molecular orbitals (LUMOs) show significant delocalization which are helpful to facilitate the enhancement of carrier mobility. The designed carbon nitrides can evidently extend the optical absorption of g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> and enhance the photocatalytic efficiency. Among them, the nitrogen-rich carbon nitride that the C<sub>6</sub>N<sub>7</sub> units is bridged by azo linkage catalyzes CO<sub>2</sub> reduction to CH<sub>4</sub> with a low limiting potential of 0.54 V and to CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH with a low limiting potential of 0.61 V, which all drive by solar energy. It is expected that the present work would motivate further experimental and theoretical studies focusing on the development of photocatalysts.

### 参考文献:

- [1] L. Huang, Z. Liu, W. Chen, D. Cao, A. Zheng, Two-dimensional graphitic C<sub>3</sub>N<sub>5</sub> materials: promising metal-free catalysts and CO<sub>2</sub> adsorbents, *J. Mater. Chem. A*, 6 (2018) 7168–7174.
- [2] Y. Jiao, Y. Zheng, P. Chen, M. Jaroniec, S.Z. Qiao, Molecular scaffolding strategy with synergistic active centers to facilitate electrocatalytic CO<sub>2</sub> reduction to hydrocarbon/alcohol, *J. Am. Chem. Soc.*, 139 (2017) 18093–18100.
- [3] X. Liu, Z. Wang, Y. Tian, J. Zhao, Graphdiyne-supported single iron atom: a promising electrocatalyst for carbon dioxide electroreduction into methane and ethanol, *J. Phys. Chem. C*, 124 (2020) 3722–3730.
- [4] X. Li, J. Yu, S. Wageh, A.A.A. Ghamdi, J. Xie, Graphene in photocatalysis: a review, *Small*, 12 (2016) 6640–6696.

### 个人简介:

颜力楷, 东北师范大学教授, 博士生导师, 主要从事多酸和二维材料催化反应微观机制的研究。曾先后在英国剑桥大学、西班牙罗维拉·维尔吉利大学、日本九州大学和美国乔治·华盛顿大学从事博士后研究和合作研究。教育部新世纪优秀人才。近五年以通讯作者在*Appl. Catal. B-Environ.*, *J. Colloid Interf. Sci.*, *J. Mater. Chem. A*, *J. Catal.*, *Inorg. Chem.*等期刊上发表SCI论文60余篇。主持国家自然科学基金、吉林省教育厅、吉林省科技厅项目等多项, 2017年获得吉林省科学技术奖自然科学奖二等奖。



## 报告题目：二维拓扑聚合物的能带结构工程及其在光解水中的应 用

报告人：荆宇

南京林业大学 [yujing@njfu.edu.cn](mailto:yujing@njfu.edu.cn)

### 摘要：

基于第一性原理计算，我们设计了一系列以杂原子三角烯为单体构成的二维共轭聚合物结构。<sup>[1]</sup>该结构同时具有 honeycomb 晶格和 kagome 晶格。尽管杂原子中心之间的距离在 1 nm 以上，其构成的 honeycomb 晶格仍然表现出了典型的狄拉克锥电子学特征(Fig.1)。<sup>[2,3]</sup>通过改变中心原子 (B, C 或者 N) 或桥位官能团结构 (C=O, O, -CH<sub>2</sub> 或者 -CMe<sub>2</sub>)，可以得到具有不同电子结构的二维聚合物。其中，以 B 或 N 为中心的二维聚合物是具有平带特性、带隙为 1.80~2.84 eV 的间接带隙半导体材料。其表现出的适合的带边位置、较高的载流子迁移率和较强的光吸收性能可以很好地满足光解水的需求。特别的是，以 N 和 B 为中心的聚合物结构可以产生足够的光生电子和空穴来分别催化析氢和析氧反应。因此，利用 B- / N 中心聚合物这种快速电子或空穴传输的单能带特性来构建串联器件将有效地抑制电子/空穴复合，从而促进全解水的进行。<sup>[4]</sup>这种以已知的有机共轭分子为结构单体设计二维共轭聚合物的思路，不仅将为凝聚态物理学开辟新的研究空间，也为光解水催化剂材料的开发提供了更多的可能。

### 参考文献：

- [1] Jing, Y.; Heine, T. *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141: 743.
- [2] Jing, Y.; Heine, T. *Nat. Mater.* 2020, 19, 823.
- [3] Galeotti, G.; De Marchi, F.; Hamzhepoor, E.; MacLean, O.; et al. *Nat. Mater.* 2020, 19, 874–880.
- [4] Jing, Y.; Zhou, Z.; Geng, W.; Zhu, X.; et al. Two-Dimensional Honeycomb-Kagome Polymers as Effective Metal-Free Photocatalysts for Water Splitting. *Adv. Mater.* 2021, 2008645.

### 个人简介：

荆宇，黑龙江桦川人，中共党员。分别于2011和2016年，获南开大学理学学士和理学博士学位。2012至2013年，于美国波多黎各大学访问学习一年。2016年至2018年底，于德国莱比锡大学和德累斯顿工业大学从事博士后研究工作，并获得玛丽居里奖学金。2020年入选第十一批江苏特聘教授。担任 *Catalysts* 期刊“Metal–Organic Frameworks for Electrocatalysis”特辑副主编。主要研究方向，绿色能源计算化学、计算材料学。截止目前共发表SCI收录论文30余篇，其中第一/通讯作者论文20篇，包括 *Nature Mater.*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Adv. Mater.*、*Nano Lett.*、*ACS Catal.*、*J. Phys. Chem. Lett.*、*Adv. Energy Mater.*等。全部论文共被引用超过2800次，3篇第一作者文章单篇他引超过100次。



## 报告题目：掺杂碳基催化剂催化氧还原活性与稳定性机理研究

报告人：李莉

重庆大学 [liliracial@cqu.edu.cn](mailto:liliracial@cqu.edu.cn)

### 摘要：

能源危机与环境污染的日益严重,迫切需要发展清洁高效的新能源。燃料电池因其清洁、高效、无噪音等特点成为第四代新型的发电技术。然而成本与寿命问题仍是阻碍燃料电池商业化进程的两大难题。开发可替代贵金属铂的高效廉价的非贵金属催化剂,特别是碳基类氧还原催化剂,成为降低燃料电池成本的关键。掺杂碳基催化剂兼具石墨烯优异的导电性和稳定性,利用掺杂原子可改变其表界面局部的原子、电子结构,从而具有较高的催化活性。然而随着此类材料氧还原初始活性与商业 Pt/C 催化剂的差别的日益减小,其稳定性和耐久性,特别是在燃料电池工况条件下初始活性的急剧衰减问题成为制约此类材料实际应用的另一瓶颈。基于此,本报告主要介绍了碳基氧还原催化剂活性与稳定性机理方面的研究进展。主要包括:碳基催化剂活性位的认识,明确催化剂表界面最优活性位结构单元;氧还原机理的解析,研究其无法在近热力学平衡电势附近发生反应的原因,解析活性产生的根本原因;失活机理的分析,寻找导致其失活的决定性因素,了解活性与稳定性之间的平衡关系。

### 参考文献：

- [1] Najam Tayyaba, Shah Syed Shoaib Ahmad, Wei Ding \*, Jinxia Jiang, Jia Li, Yao Wang, Zidong Wei \*, Li Li\*, An Efficient Anti-poisoning Catalyst against SO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>, and PO<sub>x</sub>: P, N-Doped Carbon for Oxygen Reduction in Acidic Media. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2018, 57(46), 15101~15110.
- [2] Na Yang, Li Li\*, Jing Li, Wei Ding and Zidong Wei\*, Modulating Oxygen Reduction Activity of Heteroatoms doped Carbon Catalysts via Triple Effect: Charge, Spin Density and Ligand effect, *Chem. Sci.*, 2018, 9, 5795-5804.

### 个人简介：

李莉,重庆大学化学化工学院教授、博士生导师,国家自然科学基金委优秀青年基金获得者。长期从事氢能与燃料电池相关的研究工作,围绕其技术关键,开展分子、原子层次催化反应机理、催化本征活性核心科学问题的探究。先后主持国家自然科学基金青年项目(1项)、面上项目(3项),国家863项目子课题1项,国家重大研发计划课题1项等。已发表SCI论文100余篇,其中第一或通讯作者论文40余篇,ESI热点论文1篇,ESI高被引论文2篇,1篇论文入选“2015年度中国百篇最具影响力的国际学术论文”;2017年作为第二完成人获重庆市科学技术奖一等奖(自然科学)和重庆大学科学技术奖一等奖(自然科学)。获2017-2018学年度重庆大学优秀教师,2019重庆市首届创新争先奖先进个人。担任Nano Material Science期刊编委,《催化学报》,eScience,《中国化学快报》和《物理化学学报》青年编委。





## 报告题目：CN-Based Single-Atom-Catalysts towards N<sub>2</sub>

### Reduction Reaction

报告人：甘立勇

重庆大学 ganly@cqu.edu.cn

#### 摘要：

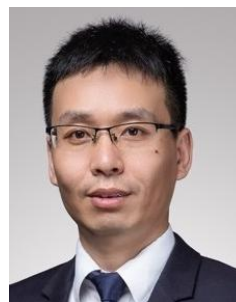
The development of advanced electrocatalysts for ambient NH<sub>3</sub> production is increasingly attractive but severely plagued by low activity and poor selectivity. Firstly, we reported first-principles results to explore the potential of transition metal (Sc~Cu, Mo, Ru, Rh, Pd, Re, Ir and Pt) atoms embedded in monolayer g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> as efficient single-atom electrocatalysts for NH<sub>3</sub> production. We found that embedding single Pt atoms in g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> enables robust stability and good electrical conductivity and particularly results in excellent activity. Furthermore, we have explicitly disclosed the nature of active centers in recently reported metal-free N<sub>2</sub> reduction catalysts containing sp<sup>2</sup>- or sp<sup>3</sup>-hybridized B sites. It is found that sp<sup>2</sup>-hybridized B is the optimal species for providing high activity for N<sub>2</sub> reduction and particularly outstanding capability to suppress the competing hydrogen evolution reaction. Specifically, the system with B substituting an edge N atom in the cavity of C<sub>2</sub>N is proposed to be highly promising for N<sub>2</sub> reduction under mild conditions.

#### 参考文献：

- [1] Hui Yin, Shu-Long Li, Li-Yong Gan\* and Ping Wang\*, *J. Mater. Chem. A*, 2019, 7, 11908.  
[2] Hui Yin, Li-Yong Gan\* and Ping Wang\*, *J. Mater. Chem. A*, 2020, 8, 3910.

#### 个人简介：

甘立勇，博士，重庆大学物理学院副教授。2007年本科毕业于重庆大学，2012年获华南理工大学博士学位，同年赴沙特阿卜杜拉国王科技大学从事博士后研究。2014年7月至2019年5月先后以副教授受聘于西南交通大学、华南理工大学；2019年5月至今，任重庆大学物理学院副教授，硕士生导师。主要从事低维能源材料性能优化及设计的理论研究，包括异相催化、光电催化、二维材料等。至今在*Adv. Funct. Mater.*、*ACS Nano*、*ACS Catal.*、*Phys. Rev. B*等重要国际学术期刊上以第一或通讯作者发表论文50余篇，主持国家自然科学基金青年项目、面上项目、重庆市自然科学基金面上项目各1项。





## 报告题目：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

报告人：李中华

哈尔滨工业大学 [lizh@hit.edu.cn](mailto:lizh@hit.edu.cn)

### 摘要：

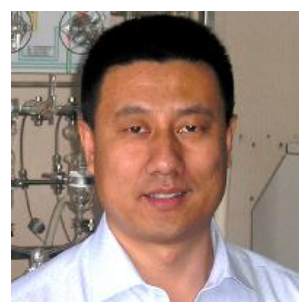
光催化分解水制氢反应涉及光吸收，载流子跃迁与传递，界面催化反应，溶液体系自由基反应等复杂的传质与催化反应过程。经过多年的研究，光电催化分解水的性能得到了极大的提高，但催化反应机制还未得到明晰。量子力学计算可以实现很多技术手段无法获得的微观反应信息，对理解光电催化机制提供了无可替代的视角。通过光催化分解水制氢和理论计算相结合的研究，探讨了若干体系的可能微观反应机制，明晰了部分高性能催化体系的本质特征。

### 参考文献：

- [1] *Applied Catalysis B: Environmental* 260 (2020) 118134.
- [2] *Applied Catalysis B: Environmental* 205(2017)271-280.
- [3] *Applied Catalysis B: Environmental* 217(2017)48-56.
- [4] *J.AM.CHEM.SOC.* 2008,130,2676-2680.
- [5] *Carbon* 128(2018)21-30.
- [6] *Journal of Alloys and Compounds* 882 (2021) 160550.
- [7] *The Journal of Physical Chemistry C* 2019, 123, 43, 26324-26337.

### 个人简介：

李中华，博士，研究员，博士生导师，哈尔滨工业大学化工与化学学院化学系微系统与微结构制造教育部重点实验室。主要从事人工光合成、能源与环境催化材料、人工智能计算化学研究工作。主持国家自然科学基金、黑龙江省青年科学基金项目多项，入选首届哈尔滨工业大学优秀青年教师培养计划。在 *Appl Catal B*、*J Mater Chem A*、*Nanoscale*、*CrystEngComm*、



*J.Am.Chem.Soc.*、*Int.J.Hydrogen Energy* 等杂志上发表 SCI 收录论文 60 余篇，被 *Chem.Rev.*、*Chem.Soc.Rev.*等权威杂志引用 1500 余次，H 因子 21，为 *Energy Environ. Sci.*、*Appl Catal B*、*J.Phys.Chem. C*、*Int.J.Hydrogen Energy*、*Appl.Phys.Lett.*等国际杂志的审稿人，国家自然科学基金通讯评议人，教育部博士后基金通讯评议人，浙江省自然科学基金通讯评议人，黑龙江省自然科学基金通讯评议人，教育部博士学位论文通讯评议人。中国化学会会员、英国皇家化学会会员。获 2015 年度黑龙江省科学技术一等奖。

## 报告题目：基于结构描述符的多相催化剂设计

报告人：程道建

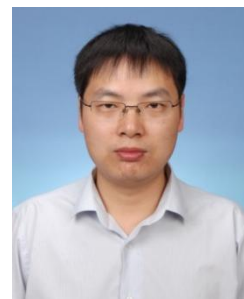
北京化工大学 [chengdj@mail.buct.edu.cn](mailto:chengdj@mail.buct.edu.cn)

### 摘要：

开发高性能催化剂是高效生产化工产品的关键途径。采用传统的试错法研发催化剂，由于缺乏指导性工具，导致开发成本高、周期长。针对上述问题，我们提出了基于“结构描述符”的催化剂设计方法：基于在原子、电子尺度下对催化剂本征结构的解析，运用与催化位点相关的、可查阅的结构特性参数，构建“结构描述符”，建立具备物理化学意义的“结构描述符”与催化剂性能之间的关联模型。该方法计算简单准确、可高效快捷筛选，已成功应用于单原子催化剂、直接合成双氧水用 Pd 基催化剂及乙烯环氧化用 Ag 基催化剂的设计。

### 个人简介：

北京化工大学教授、博导，国家优秀青年基金获得者，英国皇家化学会会士。主要从事化工领域金属合金纳米催化剂的理论设计、实验验证和应用研究。提出了基于“结构描述符”的催化剂设计方法，自主开发了“金属合金纳米催化剂智能计算设计平台”，已成功应用于电催化剂、石油化工催化剂和环境催化剂的设计。近年来在*Nat. Catal.*, *Nat. Energy*, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, *ACS Catal.*, *Adv. Energy Mater.*等国际主流期刊，以及*Ind. Eng. Chem. Res.*等国际化工主流刊物发表SCI论文150多篇。申请专利及软件著作权30余项，以第一完成人获石化联合会科技进步二等奖1项。兼任中国化工学会稀土催化与过程专委会副主任委员、科技部十四五新材料领域技术预测秘书专家组专家、石化联合会工业催化联盟青年工作委员会委员、中国石油化工催化剂评价试验基地技术委员会委员。任SCI期刊*Molecular Simulation*和*Journal of Experimental Nanoscience*区域主编。



**报告题目： The hydrogen evolution reaction of D-MXenes: Ab initio calculations**

**报告人：李能**

武汉理工大学 [lineng@whut.edu.cn](mailto:lineng@whut.edu.cn)

**摘要：**

Electrochemical water splitting through hydrogen evolution reaction (HER) associated with catalysis is an attractive method for hydrogen production, but it is still challenging due to the lack of effective and economical HER catalyst. In this work, we studied the HER activity of all 64 O-terminated double transition metal carbonitrides D-MXeneS ( $M_2M''CNO_2$ -MXenes) through well-defined density functional theory (DFT) calculations, which revealed that the outermost transition metals M' have a greater impact on the HER activity. The outermost transition metal M' is Ti, most of  $M_2M''CNO_2$ -MXenes exhibit desired HER activity on the C-side, while the outermost transition metal M' is Ta, the HER catalytic activity is better on the N side. In addition, the HER performance of the C-side or N-side for 11  $M_2M''CNO_2$ -MXenes candidates is even better than that of Pt. Among them,  $Ti_2NbCNO_2$  and  $Ti_2ZrCNO_2$  have more active sites than other  $M_2M''CNO_2$ -MXenes candidates, which makes them have better HER performance. Moreover,  $Ti_2NbCNO_2$ ,  $Mo_2TiCNO_2$  and  $Ti_2VCNO_2$  are stable HER catalysts proven by examining the thermodynamic and dynamic stability of the candidates. Especially,  $Ti_2NbCNO_2$  with a small  $\Delta G_H$  value of 0.02 eV, more catalytic sites on the C-side and better stability can be regarded as the most ideal HER catalyst. Our work paved the way on designing excellent HER catalyst candidates based on  $M_2M''CNO_2$ -MXene.

**参考文献：**

- [1] B. Anasori, M.R. Lukatskaya, Y. Gogotsi, *Nature. Rev. Mater.*, **2017**, 2, 1-17
- [2] N. Li, Xingzhu Chen, Wee-Jun Ong, et.al, *ACS Nano*, **2017**, 11(11), 10825-10833
- [3] Jiahe Peng, Xingzhu Chen, N. Li\*, et.al, *Chem*, **2019**, 5, 1-33
- [4] N. Li, J Peng, W-J Ong, et.al., *Matter*, **2021**, 4(2), 377-407
- [5] B. Huang, N. Li\*, et.al, *J. Mater. Chem. A*, **2019**, 7, 27620-27631
- [6] B. Huang, N. Zhou, N. Li\*, et.al, *Chem. Eur. J.*, **2018**, 24, 18479-18486.
- [7] B. Ding, W.J. Ong, J. Jiang, X. Chen, N. Li\*, *Appl. Surf. Sci.*, **2020**, 500, 143987.

**个人简介：**

李能，武汉理工大学材料科学与工程学院，教授，博士生导师，硅酸盐建筑材料国家重点实验室研究员，英国剑桥大学访问教授。湖北省杰青、教育部霍英东青年基金获得者。主要研究方向：环境净化与能源转化材料、前瞻性建筑新材料、玻璃和水泥基工程材料、集成计算与材料设计。现任中国硅酸盐学会固废分会青委会副主任委员，中国能源材料与器件专家委员会副主任，中国硅酸盐学会薄膜与涂层分会理事，武汉理工大学硅酸盐建筑材料国家重点实验室功能设计与调控研究室主任；武汉理工大学“材料基因工程”双一流团队首席专家。近年来在 *Chem. Soc. Rev.*、*EES*、*Chem*、*Adv. Energy Mater.*、*Adv. Funct. Mater.*、*ACS Nano*、*CCR*、*JACerS* 等杂志上发表 SCI 论文 150 余篇；ESI 高被引论文 15 篇；论文被 *Science*、*Nature* 等期刊引用 7000 余次，个人学术因子 51。受邀在国内外学术会议上做邀请报告 50 余次；主持和参与国家自然科学基金重点、面上和青年项目、国家重点研发专项和国际合作专项等 20 余项。



**报告题目：Single-atom electrocatalysts for energy and environmental materials**

**报告人：路战胜**

河南师范大学 [luzhansheng1688@126.com](mailto:luzhansheng1688@126.com)

**摘要：**

第一性原理方法在“单原子”催化领域、新型燃料电池电极材料以及钠离子电池负极材料的模拟与设计等领域中有着广泛的应用。第一性原理方法在这些应用中，能够从原子与电子层次较好地揭示催化特性、电子结构特性等材料的微观结构特性、揭示材料的构效关系及其物理本质，为新材料的设计与应用提供理论依据和新的视角。

**个人简介：**

路战胜，河南师范大学特聘教授。中原千人计划—青年拔尖人才、河南省高层次 B 类人才、河南省教学标兵，是瑞典乌普萨拉大学联合培养博士、美国加州大学博士后、客座教授。近年来围绕单原子催化、新型燃料电池电极材料和锂钠动力电池关键材料的模拟与设计等，取得了一系列成果。近 5 年来，在 ACS Catalysis, Small, JMCA 等期刊上发表学术论文 80 余篇。他引 3,796 次，H-index 为 36。主持/曾主持 5 项基金委、省部级项目 10 余项。是美国物理学会会员、中国物理学会会员。获 2021 年度河南省自然科学奖贰等奖（第 2）、"河南省优秀博士论文"等。



## 报告题目：单原子催化剂中的自旋磁矩描述符

报告人：钟文辉

曲阜师范大学 [whzhong@qfnu.edu.cn](mailto:whzhong@qfnu.edu.cn)

### 摘要：

金属单原子催化剂(SACs)已经引起了广泛的关注,由于其卓越的催化性能和高效的原子利用率。过渡金属 SACs 的催化性能强烈地依赖于金属单原子的自旋态,尤其是 3d 过渡金属。过渡金属自旋态的调控对高的催化活性的获得是极其重要的。然而,自旋和催化活性的内在关联尚不清楚。我们通过构筑氮掺杂的石墨烯负载 Fe、Co、Ni 等 3d 磁性金属单原子催化剂用于甲酸氧化、氧还原反、二氧化碳还原等反应,并通过密度泛函理论计算研究自旋和活性的关系,发现电子自旋磁矩可作为 3d 磁性金属单原子催化剂的构效关系描述符,该描述符的发现洞察了催化活性和自旋的内在关联,为过渡金属单原子催化剂的设计提供了新策略。

### 个人简介：

2007 年山东大学获学士学位,2012 年山东大学获博士学位;  
2012.7-2020.12 贵州师范学院副教授;2020.12-至今曲阜师范大学副教授。  
2015.2-2016.1 中国科学技术大学访问学者(合作导师:江俊教授)。主持国家自然科学基金 2 项。钟文辉博士长期从事燃料电池的理论模拟与设计方向,相关成果发表在 J. Am. Chem. Soc., J. Phys. Chem. Lett., J. Mater. Chem.



A, J. Power Sources, Anal. Chem.等国际主流期刊上。近年来主要研究 3d 磁性金属单原子自旋催化的理论模拟研究。

## 报告题目：多尺度摩擦化学-连结第一性原理计算到实验

报告人：杨静

中山大学化学工程与技术学院 [yangjing25@mail.sysu.edu.cn](mailto:yangjing25@mail.sysu.edu.cn)

### 摘要：

化学反应中能量转化多种多样，其中机械力直接作用于化学反应，即力化学，逐渐成为讨论的热点之一。摩擦化学作为力化学的实体表现，受到表面构造、复杂化学反应等各因素耦合作用复杂性的制约，利用理论计算将摩擦化学问题在微观尺度解构，有助于我们了解摩擦化学反应机理，并探究摩擦化学的潜在应用。研究发现，导电材料表面在摩擦力作用下，附着在表面的物质容易生成摩擦聚合物。这类聚合物虽然在大部分情况下会起到保护界面的作用，但由于生成过程的不可控、生成物的复杂多样、并且不导电，导致如微机电或纳机电开关(Microelectromechanical & Nanoelectromechanical or MEMS & NEMS)等的电子元器件的断路和老化，严重阻碍到下一代微电子元器件材料的选取和大规模发展。因此，研究摩擦聚合物的生成和摩擦动力学不仅对下一代功能性新材料的开发至关重要也促使我们对摩擦化学有进一步认识。本报告利用第一性原理结合分子动力学的多尺度计算探索摩擦化学反应机制，探讨影响摩擦系数的因子，最后报告将阐述如何搭建高通量计算平台整合摩擦作用机制结合机器学习探索新型功能性材料的设计新思路。

### 个人简介：

中山大学化学工程与技术学院，副教授。在 ACS Nano、Chemistry of Materials、Advanced Energy Materials、Physical Review B 等国际期刊发表论文 16 篇。本科与硕士就读于加拿大滑铁卢大学从事量子化学方面研究，利用 centroid molecular dynamics 研究氢原子簇在低温下的动态过程。博士就读于美国宾夕法尼亚大学师从 Andrew M. Rappe，着力于利用第一性原理计算研究摩擦聚合物在不同材料表面的生成原理。于 2018 年加入 Heather J. Kulik 团队担任博士后，从事高通量经典分子动力学结合机器学习模型设计新型低摩擦系数有机材料作为摩擦改进剂。





**报告题目: High Throughput Screening for Fast Li-Ion  
Conductors**

**报告人: 肖波**

烟台大学 [xiaoboy8@gmail.com](mailto:xiaoboy8@gmail.com)

**摘要:**

Solid-state batteries have been recently attracted much attention due to their potential excellent performance for energy storage.<sup>[1]</sup> In such device, one of the most important component is the fast Li-ion conductor with its ionic conductivity ( $\sigma_{RT}$ ) higher than  $10^{-4}$  S/cm at room temperature. However, it is still a challenge task to find an highly effective and accurate method to explore the fast Li-ion conductors. In this work, the high throughput screening model has been constructed to predict the promising candidates as the fast Li-ion conductors. Only two easily obtained features are needed during the screening steps, i.e., diameter of Li-ions diffusion path ( $D_{path}$ ) and the dimension of Li-ions network ( $D_{Li}$ ). For the training process, our screening model could almost perfectly distinguish the fast and slow Li-ion conductors in 110 experimentally available materials containing Li and various types of Anions. Most importantly, the high efficiency and accuracy of such screening model were further confirmed in the final testing process, in which the  $\sigma_{RT}$  values of all the 16 newly predicted fast Li-ion conductors (screening out from 18580 materials) with three or two-dimensional frameworks were verified to be higher than  $10^{-4}$  S/cm via the expensive molecular dynamics simulations. Our work not only provides a highly effective and accurate high throughput screening model for exploring fast Li-ion conductors, but also could motivate the future studies on other fast metal-ion conductors, such as Na, K, Mg, Al and so on.

**参考文献:**

[1] Armand, M.; Tarascon, J. M. *Nature*, 2008, 451, 652–657.

**个人简介:**

肖波副教授: 2006年毕业于辽宁师范大学, 2011年在吉林大学理化所丁益宏教授课题组获得博士学位, 后在东京大学渡边聪教授课题组从事3年的博士后研究工作, 2015年入职烟台大学, 并于2019至2020年期间在波多黎各大学陈中方教授课题组访学。研究方向为阻变存储器的工作机理以及储能材料的高通量筛选。以第一或通讯作者在 *Advanced Science* 等杂志发表论文30余篇, 单篇他引次数最高达到300+。



## 报告题目：电池与电催化过程中的界面能问题

报告人：张会刚

中国科学院过程工程研究所 [hgzhang@ipe.ac.cn](mailto:hgzhang@ipe.ac.cn)

### 摘要：

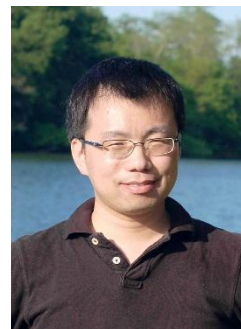
电化学能源存储与转化过程中的表界面是实现反应高效催化和转化的重要场所，电场力驱动了电化学反应的进行，表界面上的分子与固体，固体与固体之间相互作用也会影响润湿铺展和界面形核。在转化型锂离子电池负极中过渡族金属氧化物实现可逆循环的重要前提是金属  $\text{Li}_2\text{O}$  的可逆性，为了实现转化反应可逆持续存储锂离子，必须降低金属锂还原出的过渡族金属颗粒的尺寸，在固固相成核中， $\text{Li}_2\text{O}$  与金属的界面作用控制了界面形核数量与大小，模拟该过程涉及了计算两个固相界面的作用能。本论文聚焦固固界面能对电池与电催化过程中的铺展与润湿过程的影响，研究了复杂界面的界面计算方法，用  $\text{SnO}_2$  负极成核过程<sup>[1]</sup>、金属钠诱导成核过程<sup>[2]</sup>、硫氧化过程<sup>[3]</sup>三个实例分析界面能对电池负极循环性能以及电催化效果的影响。

### 参考文献：

- [1] Zhang, Lei; Pu, Jun; Jiang, Yihui; Shen, Zihan; Li, Jiachen; Liu, Jinyun; Ma, Haixia; Niu, Junjie; Zhang, Huigang\*, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2018, 10(43), 36892-36901
- [2] Xin Jin, Yue Zhao, Zihan Shen, Jun Pu, Xiangxing Xu, Chenglin Zhong, Shuo Zhang, Jiachen Li, Huigang Zhang\*, *Energy Storage Materials*, 2020, 31, 221-229.
- [3] Shuo Zhang, Qingwen Zhou, Zihan Shen, Xin Jin, Yuchen Zhang, Man Shi, Jian Zhou, Jianguo Liu, Zhenda Lu, Yong-Ning Zhou and Huigang Zhang\*, *Advanced Functional Materials*, 2021, Accept.

### 个人简介：

张会刚教授2007年在伊利诺伊大学香槟分校材料科学与工程系从事博士后研究工作，在包括 Nature 和 Science 子刊、Advanced Materials、Advanced Energy Materials、ACS Catalysis、ACS Nano 等权威学术期刊发表发表 91 篇 SCI 论文，其中以第一或通讯在 Nature Nanotechnology, Nature Communication, Science Advances 发表三篇原创论文，合作在 Nature Communication 发表五篇论文，申请 15 项中国及美国专利。承担南京大学《新能源与器件专业》本科教学任务，撰写本科研究生教材一套。2012 年获得商业投资成了基于本人专利技术的高科技创业公司(Xerion Advanced Battery Corp.)，并在公司担任 Senior Scientist 职位，研发拥有高能量密度和高功率密度锂离子电池。2013 年入选中央组织部第五批“青年千人计划”，2014 年加入南京大学现代工程与应用科学学院能源科学与工程系，研究方向主要是化学储能和固体电化学。2021 年加入中科院过程工程研究所多相复杂系统实验室。



报告题目: **Lithium Bonds in Lithium Batteries**

报告人: 陈翔

清华大学 [xiangchen@mail.tsinghua.edu.cn](mailto:xiangchen@mail.tsinghua.edu.cn)

摘要:

Lithium bonds are analogous to hydrogen bonds and are therefore expected to exhibit similar characteristics and functions. Additionally, the metallic nature and large atomic radius of Li bestow the Li bond with special features. As one of the most important applications of the element, Li batteries afford emerging opportunities for the exploration of Li bond chemistry.

In this work, we have briefly summarized the historical development of the Li bond. Especially, the similarities and differences between the Li and H bonds were discussed. Subsequently, the Li bond was described in the context of Li batteries, including discussions of sulfur cathodes, liquid electrolytes, and Li metal anodes. Specifically, lithium polysulfides are anchored in the cathode through the lithium bonds, which can resist the shuttle effects. Li ions are solvated in electrolytes by solvents and anions, which is described by ion-solvent complexes and lithium bond chemistry. The formation cation-solvent complexes can decrease the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energy level, facilitating the electrolyte decomposition and gas evolution. Based on the ion-solvent chemistry, several strategies were proposed to build stable electrolytes for lithium metal anodes, including additive design and regulating anions in electrolyte solvation shell. Besides, the reduction of lithium ions on anode frameworks is regulated by the as-formed lithium bonds, from which the lithiophilicity chemistry of anode framework is well established. The electronegativity, local dipole, and charge transfer are proposed to as key descriptors reveal the lithiophilicity. The O-doped and O/B-co-doped carbons exhibit the best Li affinity among single- and co-doped carbons, respectively. The excellent lithiophilicity achieved by O-doping carbon is further validated by Li nucleation overpotential measurement.

The discourse on the chemistry of the Li bond can provide fruitful insight into the fundamental interactions within Li batteries and thus deliver a deeper understanding of their working mechanism. In this way, a comprehensive understanding of the Li bond in Li batteries and an outlook on its future developments is presented.

个人简介:

陈翔, 2016 年及 2021 年分别于清华大学化学工程系获工学学士及博士学位, 现为清华大学水木学者博士后, 合作导师为张强教授。主要从事能源化学基础理论研究, 提出了锂键化学、离子-溶剂结构、亲锂性等概念, 注重多尺度模拟计算与机器学习的结合。以(共同)第一作者和共同通讯作者身份在 *Acc. Chem. Res.*, *Sci. Adv.*, *Chem*, *Angew. Chem.*, *J. Energy Chem.* 等期刊发表 SCI 论文 20 余篇, H 因子 34, 被引 6500 余次; 入选 2020 年科睿唯安全球高被引学者和 2020 年清华大学研究生学术新秀; 获得中国博士后科学基金面上资助和特别资助等; 担任 *Energy Storage Mater.*, *J. Mater. Chem. A*, *J. Energy Chem.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *EcoMat*, *J. Power Sources* 等期刊独立审稿人。



## 报告题目：锂硫电池的催化反应动力学调控研究

报告人：沈子涵

中国科学院过程工程研究所 [shenzihan@ipe.ac.cn](mailto:shenzihan@ipe.ac.cn)

### 摘要：

锂硫电池作为极具潜力的高能量密度二次电池备受瞩目，具有超高的理论比容量和低廉的材料成本，但是，其中间产物多硫化物的溶解扩散、充放电产物的电子绝缘性质和缓慢的动力学反应制约了其商业化应用。过渡族金属化合物被广泛应用于锂硫电池的催化剂研究，而其性能的改善大多简单的归因于导电性和极性吸附特性，这不利于从机理上来理解锂硫电池中的催化性质，使得催化剂的研究充满了偶然性因素。本工作着眼于电子结构的调控，从氮空位缺陷的引入、阳离子的掺杂到异质结的构建，在提高催化性能的同时重点分析其电子结构变化和催化性能改善的关联因素，从而为锂硫电池催化剂的设计和研发提供有效、可控的策略。主要研究内容如下：

一、以金属导电性的  $\text{Ni}_3\text{N}$  为基础材料，提出含有氮空位缺陷的  $\text{Ni}_3\text{N}_{0.85}$  催化剂，以有效地催化多硫化物的转化过程。总体策略是通过引入氮空位来合理调整  $\text{Ni}_3\text{N}$  中金属 Ni 的 3d 轨道，d 带中心的上移使得表面 Ni 的桥接位点更加强烈地吸附了端基 S 原子并削弱了多硫化物中的端基 S-S 键。该研究工作不仅仅提出了一种空位缺陷改良催化剂的有效手段，更重要的是，对其催化性能改善的原因做了机理上的解释，有助于有策略的开发新型催化剂。

二、通过在  $\text{Ni}_2\text{P}$  中掺杂 Co 元素制备了一种用于多硫化物转化的新型  $\text{Ni}_2\text{Co}_4\text{P}_3$  催化剂，与  $\text{Ni}_2\text{P}$  相比，改善了其 d 带电子结构并进一步增强了对多硫化物的吸附能力。该课题进一步提出了一种用于超高 S 负载的微反应器正极 (MLSC) 策略，只允许锂离子进出正极以限域多硫化物的反应。 $\text{Ni}_2\text{Co}_4\text{P}_3$  良好的催化活性和导电性，加速了多硫化物的转化，增强了 MLSC 的倍率性能。普遍认为，微反应器设计为构建高性能、高负载的硫正极提供了一种新的策略。

三、在三维导电碳布 (CC) 上构建了  $\text{CoSe}_2/\text{MoS}_2$  异质结构， $\text{MoS}_2$  的边缘位置具有较高的催化活性，而  $\text{MoS}_2$  的基础表面几乎没有活性，由于具有二维晶体学结构， $\text{MoS}_2$  的基底表面比边缘的更多。为了有效利用  $\text{MoS}_2$  的高催化活性，该课题将纳米级的  $\text{CoSe}_2$  生长到基底表面上以形成异质结构， $\text{CoSe}_2$  对多硫化物具有很强的化学吸附能力，但比  $\text{MoS}_2$  具有较低的催化活性。 $\text{CoSe}_2/\text{MoS}_2$  异质结构可以耦合多硫化物的吸附和催化作用，显著提高了 Li-S 电池的电化学性能。这项作为高性能 Li-S 电池提供了集成的，整体的协同吸附和催化设计。

### 个人简介：

沈子涵，男，中国科学院过程工程研究所助理研究员，2016 年，本科毕业于南京理工大学纳米材料与技术专业；2021 年，博士毕业于南京大学材料科学与工程专业；2021 年至今，任职于中科院过程工程研究所多相复杂系统国家重点实验室。已在 *Advanced Materials*, *Advanced Functional Materials*, *ACS nano* 等重要刊物上发表 SCI 论文 40 余篇。主要研究方向为锂硫二次电池催化剂的设计与理论计算。



**报告题目: Carbon fragments as highly active metal-free catalysts for the oxygen reduction reaction: a mechanistic study**

**报告人: 毛可可**

安徽工业大学 [maokeke@ahut.edu.cn](mailto:maokeke@ahut.edu.cn)

**摘要:**

In metal-free carbon-fullerene-based or defective graphene-based electrocatalysts, pentagon rings are known to play a key role in boosting catalytic activities for the oxygen reduction reaction (ORR). However, the fundamental chemical mechanism underlying the remarkable catalytic effect of the pentagon rings towards the ORR is still not fully understood. Herein, we perform a comprehensive computational study of the catalytic activities of various carbon fullerenes and fullerene fragment species, all containing pentagon rings, by using the density functional theory (DFT) and computational hydrogen electrode (CHE) methods. We find that more active sites on carbon are associated with more neighbouring pentagon rings and stronger adsorption of the key intermediates of  $O^*$ ,  $OH^*$  and  $OOH^*$  for the ORR. Importantly, two  $C_{60}$ -based fragments, namely,  $C_{60}$ -frag1 and  $C_{60}$ -frag21, show a very high activity towards the ORR, as both yield overpotentials as low as 0.389 and 0.407 V, and entail suitable adsorption free energy of  $OH^*$  and  $OOH^*$  species. These desirable chemical properties of fullerene fragments can be attributed to the high-energy HOMO orbitals, induced by the low-symmetry fullerene-fragment structures. Both the number of neighbouring pentagon rings and the degree of overall symmetry of the fragment appear to be the two important factors that can be adjusted for the design of optimal metal-free carbon electrocatalysts towards high ORR activities.

**参考文献:**

- [1] Keke Mao,<sup>‡</sup> Wei Zhang,<sup>‡</sup> Jun Dai and Xiao Cheng Zeng,\* “Carbon fragments as highly active metal-free catalysts for the oxygen reduction reaction: a mechanistic study” *Nanoscale*, 2019, 11, 19422–19428.

**个人简介:**

毛可可, 安徽工业大学讲师, 近年来主要从事基于密度泛函理论催化反应方面的理论计算与模拟, 研究, 涉及多个催化领域: 气固多相催化、电催化、光催化等。理论设计了多种新型催化材料, 探究催化反应内部机制, 取得了一系列原创性成果。近年来在 *JACS*, *Angew. Chem. Int.*, *Nanoscale* 等期刊发表多篇学术论文。主持一项国家自然科学基金青年基金项目, 多项省级项目。





## 报告题目：尿素电化学合成催化剂的设计与模拟

报告人：李亚飞

南京师范大学 [liyafei@njnu.edu.cn](mailto:liyafei@njnu.edu.cn)

### 摘要：

尿素是一种重要的氮肥，发展尿素工业对满足日益增长的粮食需求具有重要意义。工业上，尿素主要由氨和  $\text{CO}_2$  在高温高压条件反应制备，不仅能耗较大，还需要复杂的设备和循环周期合成过程来提高尿素合成效率。与此同时，尿素生产大约消耗全球 80% 的氨，而基于哈伯法的合成氨路径同样需要高温高压的反应条件。面对日益严峻的能源问题，开发绿色、高效的尿素合成方法具有重要的科学意义和实际价值，也是当前的前沿科学问题。最近，我们与实验课题组合作，实现了将  $\text{CO}_2$  和  $\text{N}_2$  通过电催化的方法直接转化为尿素，并且提出了以  $\text{NCON}$  为关键中间体的反应机理(图 1)。[1]我们在该反应机理的指导下，还通过理论计算设计了一系列新颖的二维金属硼化物作为尿素电化学合成的催化剂。[2]

### 参考文献：

[1] Chen et al. *Nat. Chem.* **2020**, 12:717-724.

[2] Zhu et al. *Nat. Commun.* **2021**, Accepted

### 个人简介：

李亚飞，南京师范大学教授，博士生导师。2006 年 6 月于重庆大学获得理学学士学位，2011 年 6 月于南开大学获得理学博士学位，2011 年 8 月至 2013 年 9 月在波多黎各大学从事博士后研究，2013 年 10 月到南京师范大学化学与材料科学学院工作，2015 年获得基金委优秀青年基金资助，2017 入选万人计划“青年拔尖人才”。长期从事二维材料的理论研究，独立工作以来以通讯作者身份在 *Nat. Chem.*、*Nat. Catal.*、*J. Am. Chem. Soc.*(3)、*Angew. Chem. Int. Ed.*(7)、*Nat. Commun.*(5)等期刊发表论文 80 余篇。所发表论文共被引用 14000 余次，个人 h 因子 65，入选 2019、2020 年度科睿唯安全球高被引科学家和 2020 年度爱思唯尔中国高被引学者。





## 报告题目：轨道调控表界面催化

报告人：刘晓静

山东大学 [liuxj2020@sdu.edu.cn](mailto:liuxj2020@sdu.edu.cn)

### 摘要：

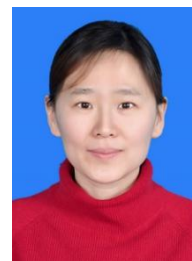
基于结构决定性能，性能决定应用的思路，我们通过调控材料表界面的本征电子结构，从本质上改善材料的催化反应性能，提升其在可再生能源催化转化领域的应用。在这里，我们主要介绍近期通过调控材料表界面轨道取向，改性材料表界面催化析氢的一部分工作。我们首次报道了二维材料 MoS<sub>2</sub> 基面不利的轨道取向是限制其惰性基面析氢性能的关键因素。并通过设计引入了缺电子元素碳来调控其基面的轨道取向，从而大幅度提升了 MoS<sub>2</sub> 的碱性电催化析氢性能。更重要的是，该策略为一系列二维 TMD 材料的基面活化提供了一个全新的思路，并且可推动此类二维材料应用到更加广泛的其他能源催化转化反应中。除了二维材料，不利的轨道取向也是制约 Pt-Ni 合金碱性析氢性能进一步提升的关键因素，通过非金属氮的引入，进一步将铂镍合金的碱性析氢性能提高到了极限值。同时，我们不仅可以赋予材料表界面有利的轨道取向，我们也可以直接准确操纵材料表界面的轨道取向而调控电子态到最佳耦合度，从而提升材料表界面催化性能。

### 参考文献：

- [1] Liu, X.\*; Wang, G. \*; et al. *Nat. Commun.* 2019, 10: 1217.
- [2] Liu, X.\*; Wang, G. \*; et al. *Sci. Adv.* 2020. 6: eeaw8113.
- [3] Liu, X.#; Wang, G. \*; et al. *Adv. Mater.* 2020, 32: 1904346.
- [4] Liu, X.\*; Wang, G. \*; et al. *Adv. Mater.* 2019, 31: 1807780.
- [5] Liu, X.#; Wang, G. \*; et al. *CHEM.* 2020, 6,1,221-233.

### 个人简介：

刘晓静，山东大学教授，近年来提出通过调控材料表界面的轨道空间取向，操控转化物分子和材料表界面之间的最佳电子耦合度，可以提升材料表界面催化和储能性能，设计了多种新型催化和储能材料。近 3 年来，在 *Nat. Commun.*, *Sci. Adv.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Adv. Mater.*, *Joule*, *Chem* 等期刊上发表 IF>10 的学术论文近 20 篇。



## 报告题目：二维 $\text{MX}_2$ 晶界的“表情包”

报告人：张助华

南京航空航天大学 [chuwazhang@nuaa.edu.cn](mailto:chuwazhang@nuaa.edu.cn)

### 摘要：

材料不可避免地含有各种各样的缺陷，包括点缺陷、拓扑缺陷和晶界等。只有单个或数个原子厚的低维材料尤为如此。本报告着重探讨二维金属硫族化合物  $\text{MX}_2$  中大量存在的奇异的折线状晶界。我们结合理论计算与高分辨实验表征，发现这类形貌多样的晶界是由  $4|8$  和  $4|4|8$  两类位错核以不同比例组合形成的，因此能形成丰富的晶界形貌。进一步发现位错核还会沿着晶界演化，导致出现更丰富的晶界“表情包”。同时，这类晶界不仅可被用于偏置化学置换反应，从而制备异质的纳米带，而且还具有本征的磁性和较高的电催化活性。

### 个人简介：

张助华，2010年于南京航空航天大学分别获得博士学位，现任南京航空航天大学教授。2009-2010年在美国内布拉斯加大学林肯分校做访问研究，2012-2017年于美国莱斯大学材料科学与纳米工程系进行博士后合作研究。长期致力于硼、碳、氮等组成的低维功能材料与结构的物理力学研究，现主持国家和省部级项目共10项。已在国际学术杂志发表SCI论文90篇，均篇影响因子10.2。2009年以来以第一/通



讯作者在Chem. Soc. Rev. (1篇)、Nature Nanotech.(2篇,并列第一)、Nature Chem. (1篇)、Science Adv. (1篇)、Nature Commun. (2篇,并列第一)、Phys. Rev. Lett. (1篇)、J. Am. Chem. Soc. (5篇)、Nano Lett. (3篇)、Angew Chem. (2篇)、Adv. Funct. Mater. (2篇)、J. Mech. Phys. Solids (2篇)等著名期刊上发表论文48篇。论文共计被引用4000余次，其中SCI他引3000余次，被Nature Nanotech.、Nature Rev. Mater.等6次选为研究亮点或封面推荐，被英国皇家物理学会Nanotechweb、美国能源部等权威学术媒体评论二十余次。

## 报告题目: The rising of intrinsic magnetic topological insulators

### $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$

报告人: 刘奇航

南方科技大学 [liuqh@sustech.edu.cn](mailto:liuqh@sustech.edu.cn)

#### 摘要:

The rising of topological materials  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$  with built-in magnetization provides a great platform for the realization of both Chern-insulator and axion-insulator phases, manifesting integer and half-integer quantum anomalous Hall (QAH) effects, respectively.<sup>[1-4]</sup> Using both model Hamiltonian and first-principles calculations, we demonstrate that rich 2D and 3D topological phase diagrams can be established with the mapping of  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$  systems. For the 2D topological phases, we provide design principles to trigger integer QAH states by tuning experimentally accessible knobs, such as slab thickness and magnetization.<sup>[3]</sup> For the 3D topological phases, we find that the surface anomalous Hall conductivity in the axion-insulator phase is a well-localized hanging around  $e^2/2h$ , depending on the magnetic homogeneity.<sup>[4]</sup> We then discuss the potential experimental signatures of the surface anomalous Hall effect in  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$ .<sup>[4, 5]</sup>

#### 参考文献:

- [1] Y. Zhao et al. arXiv:2005.14575 (2021).
- [2] C. Hu et al. *Nat. Commun.* 11, 97 (2020).
- [3] H. Sun et al. *Phys. Rev. Lett.* 123, 096401 (2019).
- [4] M. Gu et al. *Nat. Commun.* 12, 3524 (2021).
- [5] R. Lu, et al. *Phys. Rev. X* 11, 011039 (2021).

#### 个人简介:

刘奇航, 南方科技大学副教授, 本科及博士均毕业于北京大学物理学院, 曾任美国西北大学博士后、美国科罗拉多大学博尔德分校助理研究员; 主要从事以密度泛函理论为主的凝聚态理论研究, 研究兴趣包括理解材料中新奇的电学, 磁学, 光学, 缺陷, 自旋极化, 拓扑等物性, 以及功能导向的新型材料设计及预测。

近年来的研究兴趣主要集中在本征磁性拓扑材料以及如“隐藏极化”现象等凝聚态物理中的新效应问题。工作期间以主要作者身份已发表包括*Nat. Phys.*、*Nat. Commun.*、*Phys. Rev. X*、*Phys. Rev. Lett.*、*Nano Lett.*、*JACS*等多篇学术论文; 2018年入选“国家特聘青年专家”; 2020年国家重点研发计划-量子调控与量子信息重点专项(青年项目)负责人。



## 报告题目：半导体磁双层膜中的谷劈裂

报告人：唐黎明

湖南大学 [lmtang@hnu.edu.cn](mailto:lmtang@hnu.edu.cn)

### 摘要：

半导体磁双层膜是指半导体/磁性材料组成的二维异质结构，兼具空间反演破缺性和时间反演破缺性，是研究极化电子学的一种重要结构单元。这种空间和时间对称性破缺的量子结构单元可以存在电子三个自由度的极化，即空间电荷极化、基于自旋-轨道耦合(SOC)的自旋极化以及自旋-谷锁定的能谷极化。根据异质结的电子结构特点，可将其划分为 I 型、II 型和 III 型带阶三种异质结类型。相比与 I 和 II 类异质结，III 类异质结电子结构最明显的特点就是其层间存在着较大电荷转移。通过调节异质结的带阶类型可以调控磁近邻效应的强度，从而实现对谷极化强度进行调控。而这种方法其实是通过调节异质结的内建电场进行调控来实现，其本质上也是一种电学调控手段。我们将报告：考察一系列的 TMDCs 磁性异质结构后，发现只有形成第 III 类异质结时，才有可能存在大的谷极化，并以此预言了数十种可能得到大的能谷极化异质结。

### 个人简介：

唐黎明，湖南大学物理与微电子科学学院教授、博士生导师。主要研究方向：半导体磁双层膜中极化电子学。



## 报告题目：几种热电材料的第一性原理计算和中子散射研究

报告人：王保田

中国科学院高能物理研究所 wangbt@ihep.ac.cn

### 摘要：

我们采用第一性原理计算结合中国散裂中子源通用粉末衍射谱仪 GPPD、J-PARC 非弹谱仪 AMATERAS、ISIS 非弹谱仪 MARI 对近年来实验合成的具有高热电品质因子 ( $ZT \sim 1$ ) 的 MgAgSb 合金<sup>[1]</sup>进行了研究。我们发现该材料的超低晶格热导主要是由于晶格的局域畸变和声子非谐导致的，变形的岩盐晶格几乎把横向声学声子散射掉了，热量主要由径向声学声子来运输，再加上该材料非常大的光-声声子比例，我们很好地解释了该材料为何具有如此低的热导<sup>[2]</sup>。

### 参考文献：

- [1] Zhao, H.; Sui, J.; Tang, Z.; Ren, Z.\*; et al. *Nano. Energy*, 2014, 7: 97.
- [2] Li, X.Y.; Liu, P.F.; Wang, B.T.\*; Ren, Z.\*; Zhao, H.Z.\*; Wang, F.\*; et al. *Nat. Commun.*, 2020, 11: 942.

### 个人简介：

王保田，副研究员，2003 年山西大学物理系本科毕业，2006 年中科院国家天文台师从南仁东研究员获硕士学位，2011 年山西大学师从李卫东教授获博士学位。2006 至 2016 年期间，在山西大学工作，并于 2011-2015 年在瑞典乌普萨拉大学和美国纽约州立大学宾厄姆顿分校进行博士后研究。2016 年起到中科院高能物理研究所-中国散裂中子源工作，主要研究领域为凝聚态材料的物性研究，目前正承担中国散裂中子源冷中子非弹谱仪的设计。在 *Nat. Commn.*、*Npj Comput. Mater.*、*PRB*、*PRM*、*APL*、*Carbon*、*ACS Appl.&Inter.*、*Nanoscale* 等发表 SCI 论文 90 多篇。2011 年获山西省优秀博士论文奖，2015 获山西省自然科学三等奖，2016 年高能所引进优秀人才，2018 年获中物院科技创新二等奖。



## 报告题目：二维材料狄拉克锥形成的六次对称性根源

报告人：秦绪明

安阳师范学院 877688914@qq.com

### 摘要：

由于具有优异的电学性质<sup>[1]</sup>，狄拉克锥材料的搜寻和设计成为一个热门的研究领域。揭示狄拉克锥的形成机制不仅可以加深对狄拉克锥的理解，也能够为狄拉克锥材料的设计提供理论指导。由于二维狄拉克材料总是具有某种对称性<sup>[2]</sup>，所以依据材料的对称性，对材料进行分类，然后分类揭示狄拉克锥的形成机制是一个可行的方法。作为第一个被实验合成的狄拉克锥材料，石墨烯具有六次对称性。然而，不是所有具有六次对称性的二维材料都具有狄拉克锥。为了揭示具有六次对称性的二维材料具有狄拉克锥的条件，本工作在紧束缚近似的框架下，利用“分组耦合”<sup>[3,4]</sup>方案研究了六次对称性如何导致狄拉克锥的形成。提出了一个简单的、一般性的“ $6n+2$ ”规则来判别具有六次对称性的二维材料是否具有狄拉克锥。作为这个规则的应用的一个例子，进一步导出了具有六次对称性的石墨烯类的碳硅烯材料具有狄拉克锥的条件，即“ $3n+1$ ”规则。依据“ $3n+1$ ”规则，设计了一种新型的狄拉克锥材料  $\text{Si}_6\text{C}_8$ 。该材料只具有六次对称性，而不具有镜像对称性，说明其狄拉克锥确实是由六次对称性导致的。

### 参考文献：

- [1] K. Geim and K. S. Novoselov, *Nat. Mater.*, 2007, 6, 183-191.
- [2] J. Wang, S. Deng, Z. Liu and Z. Liu, *Natl. Sci. Rev.*, 2015, 2, 22-39.
- [3] X. Qin, Y. Liu, X. Li, J. Xu, B. Chi, D. Zhai and X. Zhao, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2015, 6, 1333-1339.
- [4] X. Qin, Y. Liu, G. Yang, and D. Zhao, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2020, 22, 6619-6625.

### 个人简介：

秦绪明，工学博士，安阳师范学院物理与电气工程学院讲师。2000年9月至2004年6月就读于吉林大学物理学本科专业，2004年9月至2007年6月就读于吉林大学理论物理硕士专业。2007年6月至2013年8月，在沈阳理工大学从事教师工作。2013年9月之后在东北大学攻读材料物理与化学专业博士，并于2018年1月获得博士学位。研究方向：二维材料的结构和性质的计算研究，目前主要研究兴趣是二维材料狄拉克锥能带结构成因的研究。





## 报告题目：MXenes 基材料的电子性质、催化和磁性性能调控的 理论研究

报告人：杨宗献

河南师范大学 yzx@henannu.edu.cn

### 摘要：

MXenes 具有良好的导电性、比表面积、结构可调和亲水性等独特的性质，使得其在催化、二维磁性材料和电子器件等领域具有重要的应用前景。通过官能团修饰、过渡金属原子掺杂、复合异质结构等表面修饰策略调控 MXenes 的电子结构，使得 MXenes 具有高度可调的物理和化学性质。本报告将介绍以下两个方面的工作：

(1) MXenes 基 PEMFC 阴极催化剂的理论设计。通过单原子、团簇、单层等各种表面修饰策略对 MXenes 的拓扑结构、电子结构、物化性质以及催化性能进行调控，揭示其内在的调控规律和反应机制，以期从理论上设计高性能的 PEMFC 阴极催化剂。

(2) Cr 基 MXenes 的电子性质和磁性。研究了表面功能化、掺杂、施加机械应变、构建异质结构等多种调控手段对 Cr 基 MXenes 电子性质和磁性的影响。

### 个人简介：

杨宗献，河南省特聘教授，河南师范大学教授、博士生导师。1998 年获复旦大学凝聚态物理博士学位，1999-2005 期间在美国加州大学 Irvine 分校、加拿大西安大略大学和渥太华大学、瑞典乌普萨拉大学等从事博士后或客座教授工作。主要研究领域为新型能源环境材料的理论设计；先后主持 5 项国家自然科学基金和 1 项国际合作项目。入选 2020 年爱思唯尔中国高被引学者（物理学），获河南省自然科学二等奖、全国优秀科技工作者等奖励和荣誉。



## 报告题目：低碳烷烃催化转化过程的理论计算模拟

报告人：李波

中国科学院金属研究所 *boli@imr.ac.cn*

### 摘要：

在当前工作中，结合密度泛函理论、动力学蒙特卡罗和微观反应动力学模拟揭示了低碳烷烃甲烷、丙烷、乙苯脱氢反应的过程和机理。乙苯氧化脱氢是制备苯乙烯的主要催化过程。通过第一性原理计算结合微观反应动力学详细考察了 MvK, LH, ER 以及自由基四种机理在反应中的贡献。给出了 TOF 和反应物分压之间的关系，以及表面物种覆盖度的变化情况。通过反应路径分析，指出生成产物的主要途径和相应基元反应速率。计算结果表明乙苯氧化脱氢反应以 ER 机理为主。对于铂基催化剂上丙烷直接脱氢反应，采用第一性原理计算探究了包括深度脱氢、C-C 键断裂等副反应在内的详细反应路径。通过计算得到了基元反应能垒，比较了不同 C3 物种上脱氢与 C-C 键断裂的难易程度。进一步，通过动力学蒙特卡罗模拟发现了实验上观察到的反应过程中的两个阶段。通过对 C3 物种在反应路径中“走向”的分析，揭示了反应的机理及积碳前驱体的起源。进一步通过表面吸附状态与计算所得的宏观性质（如速率、选择性等）的比较，探索了反应过程中两个阶段产生的原因，并揭示了积碳前驱体的吸附对表面位点构型的影响，进而揭示了其对反应过程、反应速率与选择性的影响。考察了负载型氧化铈催化剂上甲烷干重整反应，比较了金属表面、载体表面、金属与载体交界处、载体表面氧空位和交界处的氧空位等五类位点催化活性。在这五类位点上分别进行甲烷脱氢过程与二氧化碳活化等计算，探索了反应发生的可能位点。进一步对可能发生积碳的位点进行积碳氧化消除反应的计算及电子结构分析，提出了积碳消除的可能路径及该催化剂高稳定性的可能原因。并对常用于解释这一高稳定性的“bi-functional”机理和“step-wise redox”机理进行了补充。

### 个人简介：

2004 年 6 月于吉林大学获得硕士学位，2005 年 1 月-2008 年 12 月在德国柏林弗里茨哈勃研究所理论系攻读博士学位，于 2009 年 1 月获得物理博士学位。2011 年 12 月至 2013 年 10 月“葛庭燧奖研金”在中科院金属研究所催化材料研究部工作；2013 年 11 月以“所优秀学者”引进至中科院金属研究所催化材料研究部。获得沈阳市拔尖人才，沈阳材料科学国家（联合）实验室青年创新奖，国家超算广州天河二号“天河之星”优秀应用奖，*Chemical Engineering Journal* 和 *Journal of Energy Chemistry* 优秀审稿人，*Catalyst Editorial Board member*。主要从事理论化学计算模拟异相催化反应，已经发表 SCI 收录文章 69 篇。其中作为通讯作者在 *ACS Catalysis* 发表 8 篇文章；两篇文章入选 *Journal of Materials Chemistry A* 年度热点文章；应邀撰写 *Chemical Communication Feature Article* 一篇。



## 报告题目：用于选择性制备丙烯的催化剂的设计与机理研究

报告人：林海平

陕西师范大学 [hplin@snnu.edu.cn](mailto:hplin@snnu.edu.cn)

### 摘要：

丙烯是聚丙烯、环氧丙烷、丙烯腈、丙烯酸等高附加值化工产品的必要原材料。丙烯的传统生产主要通过石脑油的蒸汽裂解和石油的催化裂解而获得。然而，在化石能源的分布上，我国的石油资源相对匮乏，但天然气的储量却极为丰富。因此，研究丙烷向丙烯的化学转化应当具有良好的市场前景。丙烷向丙烯的化学转化可分为直接脱氢和氧化脱氢两大类。氧化脱氢的优点是平衡转化率不受热力学限制，因此可以在相对温和的条件下进行，缺点是催化反应的产物繁多，丙烯的选择性较差。与之相比，直接脱氢是强增压的吸热反应，受到热力学平衡的限制，因此需要在高温下进行，但却具有非常可观的丙烯选择性。我们近期针对丙烷直接脱氢制备丙烯的催化剂进行了研究与设计。主要思路是在催化体系中构建单原子活性中心，促使反应产物丙烯分子与催化中心以 propylene- $\pi$ 键进行结合，从而推动丙烯的生成和及时脱附，以达到提高催化效率的目的。<sup>[1-4]</sup>

### 参考文献：

- [1] Xu, Y.; Bian, W.; Pan, Q.; Chu, M.; Cao, M.; Li, Y.; Gong, Z.; Wang, R.; Cui, Y.; Lin, H.\*; Zhang, Q.\*, Revealing the Active Sites of Pd Nanocrystals for Propyne Semihydrogenation: From Theory to Experiment. *ACS Catalysis* 2019, 9 (9), 8471-8480.
- [2] Kong, N. N.; Fan, X.; Liu, F. F.; Wang, L.; Lin, H. P.\*; Li, Y. Y.\*; Lee, S. T.\*, Single Vanadium Atoms Anchored on Graphitic Carbon Nitride as a High-Performance Catalyst for Non-oxidative Propane Dehydrogenation. *ACS Nano* 2020, 14 (5), 5772-5779.
- [3] Xu, Y.; Chu, M.; Liu, F.; Wang, X.; Liu, Y.; Cao, M.; Gong, J.; Luo, J.; Lin, H.\*; Li, Y.; Zhang, Q.\*, Revealing the Correlation between Catalytic Selectivity and the Local Coordination Environment of Pt Single Atom. *Nano letters* 2020, 20 (9), 6865-6872.
- [4] Niu, K.; Qi, Z.; Li, Y.; Lin, H.\*; Chi, L.\*, Theoretical Investigation of On-Purpose Propane Dehydrogenation over the Two-Dimensional Ru-Pc Framework. *The Journal of Physical Chemistry C* 2019, 123 (8), 4969-4976.

### 个人简介：

林海平，陕西师范大学/物理学与信息技术学院/凝聚态物理专业，教授。2003 年获得青岛大学学士学位、2004 年获得英国利物浦大学（The University of Liverpool）硕士学位（优秀毕业生）、2008 年获得英国利物浦大学博士学位，硕、博导师为 Werner Hofer 教授。博士学习期间在德国马普学会 Fritz-Haber 研究所的 Karsten Reuter 教授课题组（2005-2006）进行了为期 1 年的合作培养。博士后工作期间在丹麦科技大学（Technical University of Denmark）的 Jens Nørskov 教授课题组（2008-2009）进行了多次的学术访问，并共同为 GPAW 计算软件包开发了基于格林函数方法的 STM 模拟计算模块。回国后主要从事第一性原理计算和机器学习等方面的研究工作：使用多尺度的理论计算方法对当前关键的物理、化学、材料和信息工程问题进行研究并提出解决方案。目前已在包括 Nature Chemistry、Nature Communications、Journal of the American Chemical Society、Angewandte Chemie、Nano Letters、Nano Energy、ACS Nano、Advanced Energy Materials 等国际权威学术期刊发表 SCI 论文 80 余篇，总引用 1800 余次，领域内高被引论文 3 篇，H-index = 24。



## 报告题目：一氧化碳/氮还原光电催化剂设计

报告人：尹利长

中国科学院金属研究所、沈阳材料科学国家研究中心 [leyin@imr.ac.cn](mailto:leyin@imr.ac.cn)

### 摘要：

直接利用太阳光或基于太阳能等可再生能源转换而至的电能，在温和条件下将一氧化碳还原（CORR）成高附加值的碳氢化合物以及将惰性氮分子还原成氨气（NRR）可降低现有温室气体存量、减少温室气体排放，从而可有力促进我国“碳达峰、碳中和”目标的实现。从理论计算角度出发来设计相关光电催化材料是发展并实现高效 CORR 和 NRR 的一个重要内容。近年来，我们基于 DFT 计算，结合受阻型路易斯对、应力调控以及双原子催化等概念从理论上预测了几个有望应用于 CORR 和 NRR 的光电催化剂，例如硼(B)修饰的单层 C<sub>2</sub>N<sup>[1]</sup>、B 修饰和 B/N 共修饰的黑磷<sup>[2]</sup>、B 终结的立方磷化硼和砷化硼<sup>[3]</sup>、以及过渡金属双原子修饰的氮掺杂石墨烯<sup>[4]</sup>。

### 参考文献：

- [1] Chen Z, Li J, Zhao JX, Chen ZF, Yin LC, Frustrated Lewis pairs photocatalyst for visible light-driven reduction of CO into multi-carbon chemicals. *Nanoscale*, 2019, 11, 20777.
- [2] Chen Z, Liu Z, Zhao JX, Jiao Y, Yin LC, Strain effect on the catalytic activities of B- and B/N-doped black phosphorene for electrochemical conversion of CO to valuable chemicals. *J. Mater. Chem. A*, 2020, 8, 11986.
- [3] Chen Z, Zhao JX, Yin LC, Chen ZF, B-terminated (111) polar surfaces of BP and BAs: promising metal-free electrocatalysts with large reaction regions for nitrogen fixation. *J. Mater. Chem. A*, 2019, 7, 13284.
- [4] Li HY, Zhao ZF, Cai QH, Yin LC, Zhao JX, Nitrogen electroreduction performance of transition metal dimers embedded into N-doped graphene: a theoretical prediction. *J. Mater. Chem. A*, 2020, 8, 4533.

### 个人简介：

尹利长，中国科学院金属研究所、研究员，中国科学技术大学博士生导师。1997 年本科毕业于吉林大学物理系少年班，2002 年获吉林大学物理系理学博士学位（硕博连读），2003 年至 2006 年加入中国科学院金属研究所先进炭材料研究部进行博士后研究（合作导师：成会明），2006 年博士后出站留所工作至今，期间于 2009 年 8 月至 2010 年 4 月赴日本东北大学物理系做访问学者，作为负责人承担国家自然科学基金 3 项，辽宁省自然科学基金面上项目 1 项。迄今已在 *Science*、*PNAS*、*Nature Commun.*、*Energy Environ. Sci.*、*Nano Energy*、*Adv. Mater.*、*J. Am. Chem. Soc.* 等期刊上发表 SCI 收录论文 100 余篇（其中 ESI 高被引论文 18 篇），SCI 他引 1.3 万余次，H 因子 47。2018 年获中国颗粒学会自然科学一等奖，2020 科睿唯安全球高被引作者。



## 报告题目：非金属碳基材料促进 SO<sub>2</sub> 的 O<sub>2</sub> 分子非解离氧化

报告人：岑望来

四川大学 [cenwanglai@scu.edu.cn](mailto:cenwanglai@scu.edu.cn)

### 摘要：

O<sub>2</sub> 还原反应在热、光和电催化领域都是一类非常重要的反应。由于基态 O<sub>2</sub> 分子的化学惰性，开发高性能低成本催化剂用于 O<sub>2</sub> 分子的活化一直是工业界的挑战。在碳基催化剂表面，O<sub>2</sub> 分子的活化一般通过负载或掺杂金属原子构造活性位促进 O<sub>2</sub> 分子的吸附和 O-O 键的延长来实现。这种情况下，O<sub>2</sub> 分子在与反应对象接触前已经被充分活化。我们最近的研究结果发现，在不含金属的双石墨氮掺杂碳材料表面，O<sub>2</sub> 分子通过与 SO<sub>2</sub> 分子形成共吸附结构被活化，然后经过一个较小能垒形成过氧离子-SO<sub>2</sub> 共吸附介稳态。介稳态再经过一个小能垒的 O-O 键断裂过程形成氧化产物。介稳态的出现表明 SO<sub>2</sub> 分子参与了 O<sub>2</sub> 分子的活化，降低了反应的能垒。进一步研究发现，介稳态是否存在与 N 掺杂方式、掺杂元素种类、还原性分子的属性有关。单个石墨氮掺杂、O 掺杂、CO 分子替代 SO<sub>2</sub> 分子都不能形成介稳态。这些结果表明，对于碳基催化法烟气脱硫反应，可能存在 O<sub>2</sub> 分子非解离氧化 SO<sub>2</sub> 的反应新途径。

### 参考文献：

- [1] Xuehua Zhao, Yuanyue Liu, Origin of Selective Production of Hydrogen Peroxide by Electrochemical Oxygen Reduction, *J. Am. Chem. Soc.*, **2021**, 143(25), 9423-9428.
- [2] Jieyuan Li, Shi Yin, Fan Dong, Wanglai Cen, Yinghao Chu, Tailoring Active Sites via Synergy between Graphitic and Pyridinic N for Enhanced Catalytic Efficiency of a Carbocatalyst, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2017, 9, 19861-19869.
- [3] Meiling Hou, Xin Zhang, Shandong Yuan, Wanglai Cen, Double Graphitic-N Doping for Enhanced Catalytic Oxidation Activity of Carbocatalysts, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21, 5481.

### 个人简介：

岑望来，四川大学新能源与低碳技术研究院副研究员，国家烟气脱硫工程技术研究中心副主任。2012 年博士毕业于浙江大学，2017-2018 年受 CSC 资助到得克萨斯大学奥斯汀分校化学系 Graeme Henkelman 课题组访问一年。主要从事固定源 SO<sub>2</sub> 和 NO<sub>x</sub> 的催化反应机理研究、催化材料合成制备和工程应用。在第一性原理计算模拟方面，研究兴趣是碳材料低温催化 SO<sub>2</sub> 氧化、PMS 活化污染物降解和储氢。在 *ACS Catal.*, *J. Mat. Chem. A*, *Chem. Eng. J* 等期刊发表论文若干。获四川省科技进步一等奖 1 项。担任 *Environmental Research* 期刊编委。





**报告题目: Tuning the interfacial polarization fields of single-atom catalysts by combining hexagonal boron nitride and graphene support**

**报告人: 唐绍彬**

赣南师范大学 [tsb1980@xmu.edu.cn](mailto:tsb1980@xmu.edu.cn)

**摘要:**

Single atom catalysts (SACs) have emerged as a new frontier in heterogeneous catalysis.<sup>[1,2]</sup> The lack of an effective strategy to control the polarization electric field of SACs limits their activity and selectivity. Herein, using first-principles calculations, we proposed several novel ways to tune the polarization field of SACs by combining hexagonal boron nitride (h-BN) and graphene sheets. First, we will talk about the importance of optimizing the polarization field strength of SACs for efficient nitrogen fixation. Second, we will report that a single transition metal (TM) atom sandwiched between h-BN and graphene sheets can realize stable and tunable interfacial polarization fields, promoting N<sub>2</sub> adsorption, activation, and reduction.<sup>[3]</sup> Finally, we focus on SACs supported on defective boron carbide nitride (BCN) materials, including BCN sheets<sup>[4]</sup> and nanotube.<sup>[5]</sup> The calculated results suggest that synergistic effect of BN and carbon domains comes up with the modifications of the charge polarization of single-TM-atom active site and the electronic properties of material, which has been proven to be the essential key to facilitate nitrogen reduction process.

**参考文献:**

- [1] Qiao, B.-T.; Wang, A.-Q.; Yang, X.-F.; Allard, L. F.; Jiang, Z.; Cui, Y.-T.; Liu, J.-Y.; Li, J.; Zhang, T. Single-atom catalysis of CO oxidation using Pt1/FeOx. *Nat. Chem.* 2011, 3, 634-641.
- [2] Wang, A.-Q.; Li, J.; Zhang, T. Heterogeneous Single-atom Catalysis. *Nat. Rev. Chem.* 2018, 2, 65-81.
- [3] Tang, S.-B.; Dang, Q.; Liu, T.-Y.; Zhang, S.-Y.; Zhou, Z.-G.; Li, X.-K.; Wang, X.-J.; Sharman, E.; Luo, Y.; Jiang, J.\* *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142: 19308.
- [4] Huang, Y.; Yang, T.-T.; Yang, L.; Liu, R.; Zhang, G.-Z.; Jiang, J.; Luo, Y.; Lian, P.\*; Tang, S.-B.\* *J. Mater. Chem. A*, 2019, 7: 15173.
- [5] Liu T.; Dang Q.; Zhou X.; Li J.; Ge Z.; Che H.; Tang S.\*; Luo Y.; Jiang J. *Chem. Eur. J.* 2021, DOI: 10.1002/chem.202005182.

**个人简介:**

唐绍彬, 男, 理学博士, 教授, 硕导, 2020年江西省井冈学者特聘教授, 1980年7月出生。近年来以第一或通讯作者在国外著名期刊杂志 *J. Am. Chem. Soc.*, *Advanced Materials*, *ACS Applied Materials & Interfaces*, *Journal of Materials Chemistry A*, *J. Chem. Phys.*, *J. Phys. Chem. C*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 发表论文 30 余篇, 目前为 *J. Am. Chem. Soc.*, *J. Phys. Chem. Lett.*, *J. Phys. Chem. C*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* *Journal of Materials Chemistry C* 和 *ACS Applied Materials & Interfaces* 等杂志的审稿人。主持国家自然科学基金青年基金和国家自然科学基金地区基金三项。获得 2018 年江西省自然科学三等奖, 排名第一。多次在化学年会、全国量子化学会议以及相关计算化学会议上做邀请或口头报告。





## 第十三届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会 I094

### 报告题目：二维储能材料生长机制的理论研究

报告人：谢禹

吉林学院 [xieyu@jlu.edu.cn](mailto:xieyu@jlu.edu.cn)

#### 摘要：

二维材料，如过渡金属碳化物和硫族化物，由于它们在能源存储中的广泛应用前景而备受关注。大面积、高质量样品的大规模制备是实现二维储能材料工业应用的前提。因此，理解二维材料的生长机制并探索二维材料的生长方式至关重要。在本次报告中，我将展示我们最近在二维碳化钛 ( $\text{Ti}_{n+1}\text{C}_n$ ) 和二硫化钼 ( $\text{MoS}_2$ ) 的晶体生长机制探索方面的研究工作。对于  $\text{Ti}_{n+1}\text{C}_n$ ，即所谓的 MXenes，我们从理论上预测出并在实验上观察到二维 TiC 在  $\text{Ti}_3\text{C}_2$  上的自组装生长，表明 MXenes 可能通过分子外延或化学气相沉积的方式来制备。对于  $\text{MoS}_2$ ，我们发现  $\text{MoO}_3$  的硫化可能经过三个阶段，最终将形成完全硫化的  $\text{MoS}_6$  分子作为材料的构建基元，这可能有助于过渡金属二硫化物合成参数的进一步优化。

#### 个人简介：

谢禹，吉林大学物理学院、计算方法与软件国际中心、新型电池物理与技术教育部重点实验室教授、博士生导师。谢禹本科和博士毕业于吉林大学。2011-2018年，先后在瑞士联邦理工学院、美国橡树岭国家实验室、美国莱斯大学等研究机构从事博士后研究；2019年以学术带头人身份引入吉林大学物理学院；2020年获批国家自然科学基金优秀青年项目。



谢禹的主要研究领域为新型能源材料的理论设计与优化，围绕能源材料的结构与储能物理机制等科学问题，开展了系统深入的计算模拟研究，多项研究工作得到后续实验证实，取得了如下创新性成果：解决了层状过渡金属碳化物等储能材料的表面结构难题，据此提出了多层离子吸附的储能新机理，为精准设计高容量电极材料提供了途径；设计了结构有序的高容量双过渡金属层状储能材料，得到后续实验验证，改变了该类材料是无序固溶体的传统认知；提出了单层六角碳化钛自组装生长的物理机制，建立了原子层级上实验制备金属性过渡金属碳化物能源材料的理论基础。以第一/通讯作者在Nat. Commun.、PRL、JACS、Angew. Chem.、ACS Nano和AEM等国际学术期刊发表SCI论文20余篇。发表论文总引用3500余次，H因子为30，7篇入选ESI高被引，成果被美国物理协会Viewpoint亮点报道。

## 报告题目: **Natural layered materials as ideal optical hyperbolic media**

报告人: 杨声远

新加坡科技设计大学 [shengyuan\\_yang@sutd.sg](mailto:shengyuan_yang@sutd.sg)

### 摘要:

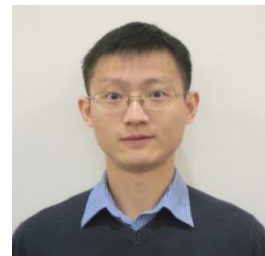
Optical hyperbolic media have special hyperbolic type light dispersion, which can produce extraordinary optical properties, like all-angle negative refraction, subwavelength imaging, and strongly enhanced spontaneous emission. The idea was initially explored in artificially engineered metamaterials. However, those structures typically have large energy dissipation/absorption, and the working frequency range is usually limited to microwave or far infrared, which poses severe challenge for applications. In this talk, I will discuss the exploration of hyperbolic medium in natural layered materials. It is found that layered materials with special electronic structures, such as 2D electrides and MoOCl<sub>2</sub>, can behave as ideal hyperbolic media with ultralow dissipation and wide working frequency range extending to the visible light. In addition, we show that small applied strain can tune the optical characters between hyperbolic and elliptic type.

### 参考文献:

- [1] Jianzhou Zhao, Weikang Wu, Jiaojiao Zhu, Yunhao Lu, Bin Xiang, and S. A. Yang, "Highly anisotropic two-dimensional metal in monolayer MoOCl<sub>2</sub>," *Phys. Rev. B* 102, 245419 (2020).
- [2] Shan Guan, Shao Ying Huang, Yugui Yao, and S. A. Yang, "Tunable hyperbolic dispersion and negative refraction in natural electride materials," *Phys. Rev. B* 95, 165436 (2017).

### 个人简介:

杨声远, 江苏省南京人。2001-2002年: 清华大学电气自动化专业。2002-2005: 香港大学, 数学物理专业, 获理学学士。2005-2011年: 得克萨斯大学奥斯汀分校, 凝聚态物理, 获博士学位。2011-2013年: 休斯敦CGG Veritas US Services公司工作, 地质分析成像工程师。2013年起在新加坡科技设计大学担任助理教授, 副教授。以往的研究课题包括磁性材料的磁动力学, 二次谐波的发射理论, 反常霍尔效应, 二维材料/拓扑材料的物理性质。目前的研究方向包括拓扑半金属, 拓扑绝缘体, 二维材料和纳米结构的物理性质, 电子晶体, 自旋和谷电子学, 量子输运等。



报告题目：二维材料的生长机制探究

报告人：韩楠楠

西北工业大学 iamnnhan@nwpu.edu.cn

摘要：

二维材料的大规模、高质量合成是实现其实际器件应用的前提。对二维材料生长机制的探究，可以帮助实验理解材料的生长过程，为材料制备过程中实验周期的减少、材料质量的提高、实验费用的降低等提供指导。本工作分别研究了石墨烯（GR）和  $\text{CrI}_3$  单层在衬底上的前期生长机制。系统地研究了石墨烯沿  $h\text{-BN}$  边缘的异质外延生长机理。发现了石墨烯生长初期沿  $h\text{-BN}$  边缘的线性生长行为，如图 1(a)；通过与铜表面上的成核生长进行对比，揭示了在低碳源化学势条件下，石墨烯沿  $h\text{-BN}$  边缘的外延生长速率远高于在铜表面上的生长速率；解释了实验上低温低碳源浓度条件下石墨烯更倾向于沿  $h\text{-BN}$  边缘生长的现象。模拟了磁性单层  $\text{CrI}_3$  在硅(111)面上的气相沉积生长。发现合成磁性单层  $\text{CrI}_3$  的决定性因素有两个，如图 1(b)。分别是：1、硅衬底上要形成一个碘过渡层，这个过渡层能够很好的稳定  $\text{CrI}_3$  的前驱体团簇，并参与反应成为单层  $\text{CrI}_3$  的一部分；2、控制  $\text{CrI}_3$  的前驱体团簇种类为  $\text{CrI}_2$ ，此团簇能够与碘过渡层很好的结合形成  $\text{CrI}_3$ ，且不利于第二层  $\text{CrI}_3$  的生成，从而获得单层的  $\text{CrI}_3$ 。

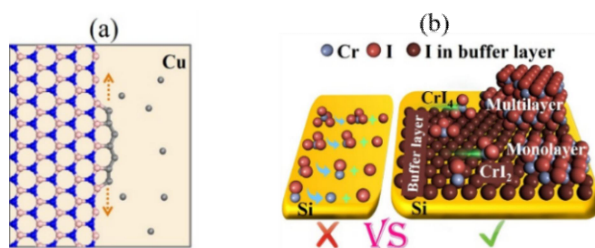


图 1. (a) 石墨烯在  $h\text{-BN}$  边缘异质外延生长的示意图；(b)  $\text{CrI}_3$  单层在 Si 衬底上的生长示意图。

参考文献：

- [1] N. Han, H. Liu, J. Zhang, J. Gao\*, J. Zhao\*, Atomistic understanding of the lateral growth of graphene from the edge of an  $h\text{-BN}$ . *Nanoscale*, 2017, **9**, 9453.
- [2] N. Han, D. Yang, C. Zhang, X. Zhang, J. Shao, Y. Cheng\*, W. Huang\*, Role of Buffer Layer and Building Unit in the Monolayer  $\text{CrI}_3$  Growth: A First-Principles Perspective. *J. Phys. Chem. Lett.* 2020, **11**, 9453.

个人简介：

韩楠楠，西北工业大学柔性电子研究院助理教授、硕士生导师。于 2013 年和 2018 年在大连理工大学物理学院获得学士和博士学位，2016-2017 年期间，在美国伦斯勒理工学院联合培养。长期致力于对二维材料结构和性质的计算模拟研究。主要包括对二维单层材料的前期生长机制研究，例如石墨烯在合金衬底、 $h\text{-BN}$  边缘的异质外延生长，蓝磷烯在金衬底上的成核生长，以及  $\text{CrI}_3$  单层在硅衬底表面依赖过渡层的生长机制等；另一个研究方向是关于二维材料的物性调控，重点关注掺杂、应力等作用对体系性质的影响。至今，在 *ACS Nano*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Nanoscale*, *Nano Research* 等国际刊物上发表学术论文 25 篇，H 因子为 14，总被引 1000 余次。主持国家自然科学基金青年项目一项，陕西省自然科学基金青年项目等省部级项目三项。



## 报告题目：核壳纳米材料的理论设计

报告人：张亮

清华大学 [zhangbright@tsinghua.edu.cn](mailto:zhangbright@tsinghua.edu.cn)

### 摘要：

核壳结构是最常见的多组分纳米材料组装方案之一，能有效地实现内核材料和壳层材料的优势互补，在催化，环境，生物医药等多个领域有着广泛的应用。对核壳材料进行合理组合可以使其展现出对应单组分材料所无法比拟的性能。报告人将主要介绍以下两方面工作：

1) 金属氧化物核壳材料的调变机制：理论预测并与实验合作制备了亚表层 Ru 掺杂的 SrTiO<sub>3</sub>。通过理论计算发现亚层 Ru 能有效得在 SrTiO<sub>3</sub> 带隙引入 Ru 的 4d 杂质态，提高表面 OER 活性。<sup>[1]</sup>在此基础上，进一步提出了对半导体氧化物材料普适的调制机理。<sup>[2]</sup>与传统的近表面金属合金体系相比具有更宽广的调变区间，从而迎合不同催化反应过程对表面反应性的要求，为设计制备高稳定性，高活性且廉价的金属氧化物核壳催化剂开辟了新的研究方向。

2) 金属合金纳米催化剂的理论设计：alloy-core@shell 纳米颗粒催化剂构型，一方面通过外层较稳定材料构成超薄壳层提高催化剂在使用中的稳定性和耐久性，另一方面，其内部合金核的组成成分比例来调制催化剂整体的反应活性。我们揭示了合金核组份与壳表面吸附能之间存在着普适的线性响应，并提出了基于单组分 core-shell 纳米颗粒反应性优化 alloy-core@shell 纳米颗粒的通用方案，预测了一系列高效的 ORR、HER 和 CO 氧化反应催化剂。<sup>[3,4]</sup>最后，我将介绍我们最近通过贝叶斯优化的方法实现了对双金属合金体系高活性结构自动筛选的工作进展。

述工作在分子原子尺度建立了不同类型多元催化材料的构效关联模型，为相关纳米颗粒催化剂的设计提供了新思路。

### 参考文献：

- [1] Akbashev, AR<sup>#</sup>, Zhang L<sup>#</sup>, Mefford JC, Park J, Butz B, Luftman H, Chueh WC\*, Vojvodic A\*, Activation of SrTiO<sub>3</sub> with Subsurface SrRuO<sub>3</sub> for Oxygen Evolution Reaction, *Energy Environ. Sci.* 2018, 11, 1762-1769.
- [2] Zhang L, Raman AS, Vojvodic A\*, Reviving Inert Oxides for Electrochemical Water Splitting by Subsurface Engineering. *Chem. Mater.*, 2020, 32 (13), 5569-5578
- [3] Zhang, L.; Henkelman, G., *ACS Catal.*, 2015, 5, 655-660.
- [4] Zhang, L. and Henkelman, G., *ACS Nano*, 2013, 7, 9168-9172.

### 个人简介：

张亮博士 2009 年本科毕业于中国科学技术大学化学物理系。2014 年，在美国德克萨斯大学奥斯汀分校化学系取得物理化学博士学位，师从 Graeme Henkelman 教授。之后，分别在美国斯坦福大学 Nørskov 课题组和宾夕法尼亚大学 Vojvodic 课题组开展博士后研究。2018 年起在美国康涅狄格大学化学与生物分子工程系担任助理教授开展独立科研工作。2019 年 8 月全职回国，在清华大学燃烧能源中心/车辆与运载学院担任助理教授，特别研究员。主要研究方向为理论与计算催化，能源与环境相关材料理论设计，加速分子反应动力学方法发展等。



## 第十三届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会 I098

### 报告题目：水界面物理化学过程的多尺度模拟

报告人：朱重钦

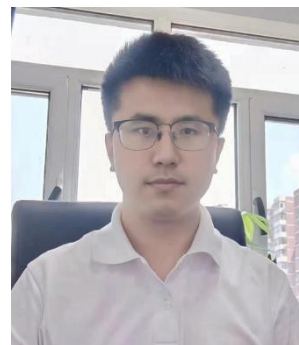
北京师范大学 [cqzhu@bnu.edu.cn](mailto:cqzhu@bnu.edu.cn)

#### 摘要：

水无处不在，而水与固体的界面在很多领域多起到重要的作用。当前，水与界面的相互作用通常停留在如界面水滴接触角的宏观描述上，分子尺度上的理解并不多见。我们一直关注界面水分子特性并开展了一系列研究。这个报告中，我将重点关注在分子尺度上水如何参与调控界面物理功能：（1）研究了晶格参数对水在界面浸润性的影响，提出了分子尺度浸润的概念。基于蛋白质结构，用宏观的接触角表征了所有分子氨基酸的亲疏水性。（2）理论预测了非受限条件下，二维冰在固体表面的形成，其中一个预测的相近期被北大江颖教授研究组在实验上独立观察到；进一步与实验合作，我们给出了表面上二维冰生长的分子机制以及二维冰存在对于宏观冰的生长模式影响。

#### 个人简介：

朱重钦，2010年毕业于中国科学技术大学，2016年于中国科学院物理研究所获得博士学位。2015年至2020年分别在美国内布拉斯加大学林肯分校以及美国宾夕法尼亚大学从事博士后研究。2021年初成为北京师范大学化学学院以及教育部理论及计算光化学重点实验室教授。2020年入选海外高层次人才青年项目。主要研究方向是表/界面水体系微观结构及动力学，大气化学以及水的生物学效应的理论研究和相关计算方法发展。共发表论文40余篇，其中作为第一/共一/通讯作者共发表Nature 1篇，Nat. Comm. 2篇，Sci. Adv. 1篇，Proc. Natl. Acad. Sic. 5篇，J. Am. Chem. Soc. 5篇，Phys. Rev. Lett. 1篇，Nano. Lett. 1篇等。





**报告题目： Intermolecular hydrogen-bonding of confined water**

**报告人： 王志刚**

吉林大学 [wangzg@jlu.edu.cn](mailto:wangzg@jlu.edu.cn)

**摘要：**

Water is ubiquitous on Earth and dominates chemical and biological processes in daily life. The study of hydrogen bond properties of confined water is closely related to seawater desalination and even water transport of cell membrane channels. Since the discovery of water flux in thin carbon nanotubes in 2001, extensive studies have been devoted to extraordinary water behaviors in confined spaces for their potential applications in the artificial water channel and desalination. In this talk, we report the latest developments in confined water research. Our work proposed a step-by-step flipping model of confined water chains, which resulted in the ability of a single-file water chain to retain its original orientation for a long time in short CNTs. Using the CNT as the model system, we demonstrated that water molecules rotate easily within the ultraconfined space (smaller than the scope of the van der Waals radius) using quantum simulation, which currently cannot be observed using classical simulations. Pauli repulsion plays an important role in enhancing the rotation process. Based on high-precision *ab initio* calculations of first-principles, we found the uncooperative effect of hydrogen bond on water dimer. This work highlights the uncooperative effect of hydrogen bond attributed to exchange repulsion of electrons as the mechanism for stabilizing water dimer in vapor phase, and open a new perspective for studies of hydrogen-bonded systems. In addition, through atomic-level researches, we discovered a short-range 5775 defect on the bilayer ice with Au (111) surface support. The defect formation does not alter the overall four-coordinated H-bond network. It is hoped that the results and processing methods of these works in understanding the fundamental problems in the relevant areas at the atomic level and promoting their role in applications in materials, biology, etc.

**个人简介：**

王志刚，吉林大学教授。2001年本科毕业于吉林大学物理学院基地班，2006年于吉林大学获得理学博士学位，师从潘守甫先生。2011年破格晋升为教授，2012年被遴选为博士生导师，研究方向为复杂分子系统中的相互作用。在超原子的结构与功能特性以及分子间相互作用的电子关联特性研究方面取得了系列进展，提出了超原子物理学的概念和方向，提出了水的氢键特性类共价视角，在原子层次上建立了一些有效的计算分析方法，成果受到学术界广泛认可。在SCI检索期刊发表论文100余篇，被SCI引用1500余次。承担有20余个SCI检索期刊及其它一些杂志的审稿工作，以及履行有多个学术评价的评审人职责，任职多个全国性学术组织委员或理事。获评吉林省“人才18条”新政C类（部级领军）人才、吉林大学唐敖庆岗位教授。





报告题目：多孔冰相预测及其储氢性能研究

报告人：刘源

中山大学 [liuy2265@mail.sysu.edu.cn](mailto:liuy2265@mail.sysu.edu.cn)

摘要：

多孔冰是水科学研究领域一个新的分支，也是一类新的多孔材料，其内部具有类沸石、MOF 等多孔材料的孔隙结构。基于 3 种不同的策略，我们预测了一些多孔冰的晶体结构相，丰富了水的结构相图，进一步拓展了人类对于水的认知。首先，基于团簇拼接构建固体新相的思想，通过笼形水团簇拼接，可以构建一些新的晶体冰候选结构，结合第一性原理相图计算，我们预测了一个多孔冰相 sL。其次，基于已知固体结构进行原子替代预测固体新相的思想，通过类比已知沸石的晶体结构，进行骨架原子替代，构建大量可能的多孔冰候选结构相，然后结合第一性原理计算和分子动力学模拟，筛选出可以稳定存在于水的负压相图上的多孔冰结构 EMT 和 FAU，并对 EMT 结构进行了储氢研究，其储氢量可以达到 12.9wt%；最后，基于主客体化学的思想，以碳纳米管作为客体分子，使其浸没于液体水中，我们通过分子动力学模拟，在室温下，直接观察到了液体水自发形成十余种不同的多孔冰，为了便于类比 MOF 和 COF，我们把它们统一命名为 WOF (water oxygen-vertex framework)。然后，选用 WOF I\_f 结构，其质量密度为 0.32 g/cm<sup>3</sup>，约为常见冰 Ih 密度 (0.93 g/cm<sup>3</sup>) 的 1/3，进行了储氢研究，其储氢量可以高达 27.5wt%，美国能源部关于储氢材料储氢量 2025 年目标值 (5.5wt%) 的 5 倍，而且其结构可以在近常压下保持稳定，或许将为氢能源的大规模利用提供一种新的储氢方案。

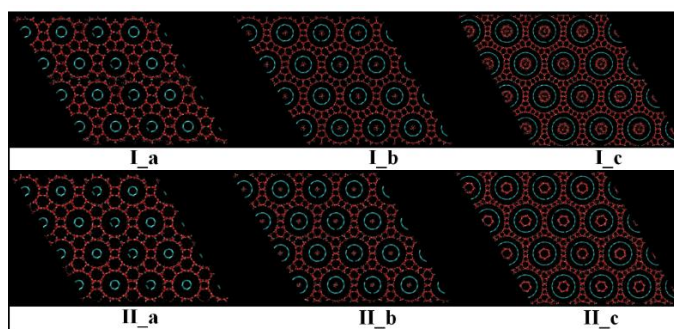


图 1. 以碳纳米管作为客体分子，液体水自发形成的几种多孔冰结构。

个人简介：

刘源，中山大学化学工程与技术学院副教授，硕士生导师，2016年博士毕业于瑞典林雪平大学(Linköping University)。目前为止，已发表SCI收录论文20余篇，其中近三年以第一作者（含共同一作）身份，在Nature、PNAS、JACS和Nanoscale Horizons上发表论文5篇，主持并已结题国家自然科学基金一项。主要从事水科学相关研究工作：多孔冰相的预测及应用、可燃冰形成与分解的微观过程、水冰在固体表面的异相成核、固体表面润湿性调控等理论模拟研究。



报告题目：碳氮二维材料的结构与性质调控

报告人：袁清红

华东师范大学 [qhyuan@phy.ecnu.edu.cn](mailto:qhyuan@phy.ecnu.edu.cn)

**摘要：**二维碳氮材料由于其半导体器件，高性能催化剂，锂离子电池，超级电容器，燃料电池，储氢材料等各种应用中的巨大潜力而备受关注<sup>[1]</sup>。与无带隙的本征石墨烯不同，二维碳氮材料的物理和化学性质高度依赖于其氮原子的含量与分布。目前实验上通过对石墨烯进行氮掺杂或者化学气相沉积法合成的氮掺杂石墨烯，其掺杂浓度普遍很低，且各种类型的氮原子（石墨氮，吡咯氮，吡啶氮）混合掺杂<sup>[2]</sup>。基于第一性原理的理论计算结合局部粒子群优化（PSO）算法方法，我们研究了不同 C/N 比的二维碳氮化物（ $C_{1-x}N_x$ ）的稳定结构。研究发现，低氮掺杂浓度的  $C_{1-x}N_x$  结构中的石墨氮和吡啶氮具有相似的形成能，而当氮浓度高于 25% 的原子比时，吡啶氮的碳氮二维结构具有更低的形成能。由于低氮掺杂浓度的  $C_{1-x}N_x$  结构具有比高氮掺杂浓度的结构更低的形成能（以氮气分子和石墨烯为参考），因此具有低氮掺杂浓度的碳氮二维材料更易获得。这一系列的理论计算结果不仅解释了实验上合成的氮掺杂石墨烯中氮原子浓度偏低的原因，同时也揭示了低氮掺杂浓度石墨烯中石墨氮和吡啶氮共存本质原因。进一步，我们提出可以通过使用不同的碳和氮源以及在较低温度下生长氮掺杂石墨烯来克服混合掺杂和低氮浓度的限制<sup>[3]</sup>。

在所有的碳氮二维结构中，我们发现  $C_3N$  这一材料具有中等大小的带隙（~1.2 eV）并且已被实验所合成。我们的理论研究发现可以通过堆垛和外加电场对其  $C_3N$  进行大范围的带隙调控。与单层  $C_3N$  相比，AA' 和 AB' 堆叠的双层  $C_3N$  的带隙均减小，且 AA' 堆叠结构带隙的减小是 AB' 堆叠结构的两倍。我们的物理模型和理论计算表明双层堆叠结构带隙不同的主要由两层之间  $p_z$  轨道的重叠数量不一样。除堆垛外，外加电场也能实现对 AB' 堆叠的双层  $C_3N$  的带隙调控，在 ~1.4 V nm<sup>-1</sup> 的电场下，AB' 结构中的带隙降低近 0.6 eV。这一系列的理论预测结果均得到了实验的证实。双层  $C_3N$  这一特殊电子性质为高性能碳基电子学的发展提供了新的契机<sup>[4]</sup>。

**参考文献：**

- [1] Wang, X.; Li, X.; Zhang, L.; Yoon, Y.; Weber, P. K.; Wang, H.; Guo, J.; Dai, H. *Science* 2009, 324: 768-771.
- [2] Rao, C.N.R.; Gopalakrishnan K.; Govindaraj, A. *Nano Today* 2014, 9: 324-343.
- [3] S. Bu,<sup>#</sup> N. Yao,<sup>#</sup> M. A. Hunter, D. J. Searles,\* Q. Yuan,\* “Design of Two-dimensional Carbon-Nitride Structures by Tuning the Nitrogen Concentration” *NPJ Comput. Mater.*, 6, 128, 2020.
- [4] W. Wei, S. Yang, G. Wang, T. Zhang, W. Pan, Z. Cai, Y. Yang, L. Zheng, P. He, L. Wang, A. Baktash, Q. Zhang, L. Liu, Y. Wang, G. Ding, Z. Kang, B. I Yakobson, D. J. Searles, Q. Yuan, “Stacking-Induced Bandgap Engineering of 2D-Bilayer  $C_3N$ ”, *Nat. Electron.* 2021, <https://doi.org/10.1038/s41928-021-00602-z>.

**个人简介：**

袁清红，华东师范大学研究员。2010年获香港中文大学理学博士学位，之后在香港理工大学从事博士后研究工作，2012年加入华东师范大学物理系并于2017年晋升为研究员。长期从事低维碳材料结构、性质以及生长机制的理论研究，揭示了若干类型低维碳纳米材料的关键生长机制，提出的理论被国内外多个课题组的后续实验结果证实。发表学术论文50余篇，其中以第一或通讯作者发表的论文包括*Nat. Mater.*, *Nat. Electron.*, *Phys. Rev. Lett.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Nano Lett.*, *Nano. Today*, *Sci. Adv.*, *Adv. Funct. Mater.*等。



## 报告题目：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

报告人：贾瑜

河南大学 [jiayu@henu.edu.cn](mailto:jiayu@henu.edu.cn)

### 摘要：

催化反应往往涉及到催化剂与吸附分子之间电荷的转移，这就要求催化剂的设计需要其活性位点满足在费米能级附近具有较高的电子态密度、高载流子输运速率和适当的热力学稳定性。基于这些的要求，我们最近提出“二维非晶安德森局域态”和“表面范霍夫奇点”两个概念可能在催化剂的设计方面有一定的指导作用。首先，随着对二维材料的研究深入，稳定的二维的非晶单层在实验室通过各种各样的手段都可以制备出来。如，典型的二维非晶材料石墨烯、 $\text{WO}_3$ 、 $\text{TiO}_2$  和  $\text{MoS}_2$  等。<sup>[1,2]</sup>二维非晶在晶体结构长程无序和维度限域效应共同作用下，安德森局域态会由体相连续分布的尾态变成离散化的尾态，并且态密度峰值更加明显，电子结构十分局域，可以明显调节分子吸附的强度和反应势垒，进一步和实验组合作制备出的二维非晶  $\text{MoO}_3$  电催化产氨发现效率得到明显提升。<sup>[2]</sup>其次，对于体相的范霍夫奇点往往是在体相能级内部，但我们可以构建一些低维体系，使范霍夫奇点靠近表面费米能级处；如 Graphene/ $\text{Ca}_2\text{N}$  异质结，拓扑材料  $\text{Pt}_2\text{HgSe}_3$ ，Li 插层 BN 等；<sup>[3]</sup>Graphene/ $\text{Ca}_2\text{N}$  异质结利用电子化合物  $\text{Ca}_2\text{N}$  较小功函的特点能够将表面电荷转移给 Graphene，从而将石墨烯具有  $\pi^*$  反键态的范霍夫奇点调节到了费米能级附近（表面范霍夫奇点），对 Graphene/ $\text{Ca}_2\text{N}$  在 CO 氧化方面的应用，发现表面范霍夫奇点起到了电子库的作用能够有效提高分子吸附能力和降低 CO 氧化过程中的反应势垒，大大提高了其催化的效率。<sup>[3]</sup>重要的是，相较于传统掺杂提高催化剂的活性，安德森局域态和表面范霍夫奇点是表面整体的效应，因此整个电子态是贯穿在整个催化剂的表面，整个区域都有可能为活性中心，从而提高了催化效率。

### 个人简介：

贾瑜，河南省特聘教授，河南大学攀登计划特聘教授，2003 年郑州大学凝聚态物理博士研究生毕业，先后在美国橡树岭国家实验室，田纳西大学、威廉玛丽学院等进行学术交流访问。曾任郑州大学物理工程学院物理系主任、副院长，学院教授委员会主席；兼任教育部高等学校大学物理教学指导委员会副主任委员、委员；教育部大学物理教学指导委员会中南地区工作委员会主任委员、《物理工程》杂志副主编，全国计算物理研究会副理事长、中国材料学会计算材料分会委员、河南省物理学会常务理事。现任河南省量子功能材料国际联合实验室常务副主任。



从事材料特性模拟、量子生长与调控、表面生长机理、二维材料、纳米摩擦和储氢材料探索等方面的研究工作，主持和参加过“973”计划、国家自然科学基金、河南省创新杰出人才基金、河南省杰出青年科学基金等20余项。在国际刊物上发表SCI收录论文270余篇，引用5000余次；研究成果入选“河南省首届高校十大科技进展”，获河南省科学技术进步二等奖。

## 报告题目：经济、高效、稳定单原子尺度催化剂设计的理论计算研究

报告人：李顺方

郑州大学 [sflizzu@zzu.edu.cn](mailto:sflizzu@zzu.edu.cn)

### 摘要：

近十年来，单原子催化剂的理论设计和实验制备已经成为催化领域国际研究热点之一。随着制备方法和技术手段的提升，研究人员将纳米过渡族金属颗粒高度分散在各种合适衬底上，形成原子团簇，甚至原子级高度分散的单原子催化剂(SAC)体系。各种实验和理论研究表明，在衬底上增强过渡族金属单原子和衬底之间的电荷转移和轨道杂化等金属-载体相互作用(EMSI)会对单原子的稳定性和催化活性造成显著影响。然而金属单原子通常被钉扎在氧化物衬底的氧缺陷或一些衬底的台阶缺陷位置处，而这些衬底表面上的本征缺陷位点数目有限，因而能够稳定的单原子活性位点的负载率偏低，已经成为制约单原子催化剂产业化的主要瓶颈。

本工作中，课题组成员从理论计算上预言了几种可行方法来增强过渡族金属单原子与无缺陷衬底之间的相互作用和催化活性的方法：1) 对衬底进行应力调控，进而调控单原子与衬底之间的 EMSI 及其活性位点的能级位置，从而改善 SAC 的稳定性和催化活性。2) 把过渡族金属单原子沉积在无缺陷的衬底上，形成稳定的单原子厚度的“幻数”团簇，并利用团簇中原子之间的协同效应来增强 SAC 的稳定性和催化活性。

### 个人简介：

李顺方，男，1976年4月出生。博士，博士生导师；郑州大学物理学院教授，副院长，河南省物理学会常务理事，2016年7月起至今兼任中国材料学会计算材料分会委员，教育部学位中心博士、硕士学位论文评审专家。1999.7 本科毕业于河南师范大学物理系，2004年7月博士毕业于中国科学院固体物理研究所，到郑州大学物理工程学院工作至今。2006.03-2006.06，美国哈佛大学物理系，访问学者；2007.06-2008.09，英国伦敦大学大学学院从事博士后研究；2010.04-2012.06，美国田纳西大学，物理&材料系&橡树岭国家实验室，博士后研究；2018.03-至今，郑州大学物理学科特聘教授。



主要研究领域包括三个方面：1) 低维材料生长机制、电子结构、物性和应用的第一性原理计算研究；2) 高效、经济、功能型纳米催化剂设计；3) 纳米尺度下的摩擦学。2013年获得河南省科技创新人才杰出青年基金支持，主持在研国家自然科学基金面上项目1项、主持完成国家自然科学基金3项、作为主要参与人参与完成国家自然科学基金2项、主持郑州大学物理学院物理学科推进计划重点项目1项。在包括 Phys. Rev. Lett.、Phys. Rev. B、J. Am. Chem. Soc.、Adv. Sci.、J. Mater. Chem. A、Nanoscale、ACS Appl. Mater. Interfaces、J. Phys. Chem. C、Phys. Chem. Chem. Phys.、等国际主流杂志上发表 SCI 论文 50 多篇。先后获得 2008 年河南省教育厅学术技术带头人、2009 年河南省青年骨干教师培养对象、2018 年度河南省优秀教师称号对象等荣誉称号，河南省科技创新团队科研骨干，2015 年获得河南省科学技术进步奖贰等奖，第 3 名；2020 年获得河南省自然科学奖贰等奖，第一名；2021 年获得第三批河南省首批科普专家称号。



**报告题目: Non-negligible effects of electrochemical environment factors in density functional theory calculation**

报告人: 李佳

清华大学深圳国际研究生院 [li.jia@sz.tsinghua.edu.cn](mailto:li.jia@sz.tsinghua.edu.cn)

**摘要:**

Electrocatalysis has provided a promising way for energy conversion, chemical production, pollutant degradation, etc. Elucidating the underlying mechanisms of related reactions could make significant contributions to more reasonable and goal-oriented design of better catalysts, in which density functional theory (DFT) calculations could provide some atomical and quantum mechanical insights considering the difficulties of characterizing intermediates in experiment. However, the environment simulated in traditional DFT calculations is usually established in vacuum and constant-charge conditions, which is far away from real electrochemical conditions, including effects of solvents, electric double layer, applied potential, etc. These distinctions could generate significant inconsistencies in conclusions compared with experimental results sometimes, for which how to involve these environmental factors has been a rising issue in electrochemical calculations. Here, we utilized the constant potential methods and solvation models developed in recent years to evaluate the performances of different N-sites in graphene and adsorption problems on single-atom catalysts (CoPc) and provide distinct insights into these processes in contrast with traditional calculations. Our results confirmed the nonnegligible effects of electrochemical environment factors for more accurate and reasonable explanations for electrocatalysis.

**个人简介:**

李佳, 清华大学深圳国际研究生院副教授, 博士生导师, 广东省(首批)能源与环境材料创新团队核心成员, 广东省本土科研团队核心成员。2001年于中山大学本科毕业, 2009年于清华大学博士毕业, 2009-2010在德国马普学会 Fritz-Haber 研究所从事博士后研究工作。2011年4月加入清华大学深圳国际研究生院。目前主持多项国家自然科学基金项目、深圳市基础研究学科布局项目等, 参与多项国家重点研发计划, 国家自然科学基金重点项目, 广东省重点领域研发计划等。主要从事计算材料学研究, 在低维材料模拟与器件设计等方面作出了一系列原创性工作; 发表论文 110 余篇, 论文引用数 5100 余次, H 因子 39。2009 年获得清华大学物理系吴有训奖, 2013 年获得深圳市海外高层次 B 类人才, 2019 年获得中国材料研究学会计算材料学分会的“计算材料学青年奖”。目前担任中国材料研究学会计算材料学委员会委员。



## 报告题目: Theoretical Investigation on the Electronic Properties of Monochalcogenide based on Main-group Metal

报告人: 黄玉成

安徽师范大学 [huangyc@mail.ahnu.edu.cn](mailto:huangyc@mail.ahnu.edu.cn)

### 摘要:

近年来,人们关于二维材料(2D)的研究焦点已从石墨烯拓展到BN、磷烯、过渡金属硫化物等其它新型2D材料中。我们研究小组则重点关注了基于主族金属的III/IV-VI硫化物2D材料,并对其电子结构进行了探索和改性。以电子结构等物性为指导,进一步探索了其在光、电催化领域的可能应用。在本报告中,针对于黑磷相的IV-VI主族金属硫化物,报告人将从本征缺陷、异原子化学掺杂、异质化、外加场等方面探讨这些因素对电子结构的影响,并提出多种策略分离异质结中的载流子;针对于具有内禀电场的蓝磷相IV-VI主族金属硫化物,报告人一方面将探讨其压电性能,并给出影响压电效应的内在规律;另一方面将展示如何利用内在偶极,调控其与石墨烯形成的肖特基势垒。

### 个人简介:

黄玉成,博士,教授,博士生导师,安徽省杰出青年基金获得者。近年来,围绕低维纳米材料的物理性质和催化性能开展了系列理论计算和模拟研究,发表论文91篇,H因子22。担任如Nature Comm.等多达五十余种国际同行评审期刊的审稿人,国产领军期刊Nano Res.青年编委。成



果以第一作者、通讯作者发表在诸如J. Am. Chem. Soc., ACS Catal., J. Catal., J. Phys. Chem. Lett., Nanoscale Horiz., J. Mater. Chem. A/C, Small, ACS Appl. Mater. Interfaces, Inorg. Chem., Nanoscale, Chem. Comm., J. Chem. Phys.等国际主流及中国期刊Nano Res., Green Energy Enviro.等杂志上,多次受邀在国际、国内等会议做邀请或口头报告。一些研究进展已被学院、学校官网及国内主要媒体报导。



## 报告题目：氮化碳等光催化体系的计算模拟

报告人：林伟

福州大学 [wlin@fzu.edu.cn](mailto:wlin@fzu.edu.cn)

### 摘要：

近年来，含氮化碳的光催化体系研究已有大量的报道，不同合成手段所得到的氮化碳类型也越来越丰富，但是这些氮化碳光催化剂的基本结构还尚未十分清晰，这严重限制了对其构效关系的深入了解，并制约了相关研究领域的进一步发展<sup>[1]</sup>。现有报道的氮化碳的氮/碳共轭结构大多为三嗪或七嗪单元，实验室也有较多的手段证实三嗪或七嗪单元的结构。根据合成条件不同，连接三嗪或七嗪单元之间的方式会有所差异，这导致不同聚合度的氮化碳催化剂的生成。根据聚合度从低到高大体可分为几大类：melon 型；PTI/PHI；或石墨相等氮化碳<sup>[1-2]</sup>。系统的对这些类型氮化碳的理论计算研究还相对缺乏，而且对不同类型的氮化碳构型和性质的对应关系还未有足够清晰的了解。再者，近年来 PTI-CN 和 PHI-CN 等既有较好结晶度或者较高催化性能的新型氮化碳相继得到报道<sup>[3]</sup>，使得氮化碳体系变得越来越丰富。在这个报告中，我们将介绍与实验组合作所构建的各类氮化碳模型、改性的氮化碳结构，其对应的构效关系、光催化反应机理、及激发态动力学性能等<sup>[3-6]</sup>。同时，我们将进一步介绍类似的研究手段应用到其他催化体系的研究<sup>[7-10]</sup>。

### 参考文献：

- [1] Kessler, F. K.; Zheng, Y.; Schwarz, D.; Merschjann, C.; Schnick, W.; Wang, X.; Bojdys, M. J. *Nat. Rev. Mater.*, 2017, 2: 17030.
- [2] Lin, L.; Yu, Z.; Wang, X. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019, 58: 6164.
- [3] Lin, L.; Lin, Z.; Zhang, J.; Cai, X.; Lin, W.; Yu, Z.; Wang, X. *Nat. Catal.*, 2020, 3: 649.
- [4] Yang, P.; Zhuzhang, Y.; Wang, R.; Lin, W.; Wang, X. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019, 58: 1134.
- [5] Tong, Y.; Wei, C.; Li, Y.; Zhang, Y.; Lin, W.; *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2020, 22: 21099.
- [6] Zheng, M.; Li, Y.; Ding, K.; Zhang, Y.; Chen, W.; Lin, W.; *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2020, 22: 21872.
- [7] Zheng, M.; Li, Y.; Ding, K.; Zhang, Y.; Chen, W.; Lin, W.; *J. Mater. Chem. A*, 2020, 8: 7412.
- [8] Zheng, M.; Xu, H.; Li, Y.; Ding, K.; Zhang, Y.; Chen, W.; Lin, W.; *J. Phys. Chem. C*, 2021, accept.
- [9] Zheng, M.; Li, Y.; Ding, K.; Zhang, Y.; Chen, W.; Lin, W.; *Appl. Surf. Sci.*, 2021, 538: 148010.
- [10] Liu, G.; Huang, W.; Li, Y.; Ding, K.; Chen, W.; Zhang, Y.; Lin, W.; *Appl. Surf. Sci.*, 2021, 555: 149728.

### 个人简介：

林伟教授，2014年博士毕业于加州大学圣迭戈分校，之后分别于明尼苏达大学和美国西北大学从事博士后研究。2017年获福建省“闽江学者”特聘教授奖励计划加入福州大学化学学院。现为化学学院院长助理、理论化学与分子设计计算研究所所长。研究领域为理论与计算催化，近年来围绕氮化碳等光催化体系开展电子结构、反应机理、及非绝热动力学等方向展开工作。



## 报告题目：二维材料中铁电序和磁序、拓扑序的耦合效应

报告人：陆贇豪

浙江大学 [luyh@zju.edu.cn](mailto:luyh@zju.edu.cn)

### 摘要：

二维材料中电有序和磁有序的耦合对于二维多铁性理论研究和基于磁的信息存储与操作的未来发展都具有重要意义。在这里，我们介绍了一种通过电有序转变实现磁相变的方案。基于第一性原理的计算，我们发现二维金属硫（硒）磷酸盐可表现出两种不同的相：一种是反铁电-反铁磁相，另一种是铁电-铁磁相，其中电序和磁序是强耦合的。重要的是，电极化是平面外的，所以利用栅极电场可以很容易地改变磁场。同时我们也发现可通过二维铁电序控制拓扑有序性，揭示了一系列具有特殊磁电耦合的二维多铁性，具有很好的实验实现和实际应用前景。

### 个人简介：

陆贇豪，浙江大学教授，致力于通过第一性原理计算研究低维材料的奇异量子性质，并揭示其普适性意义，取得了一系列原创性成果。已在Nature, PRL等国际期刊发表SCI论文90余篇，文章共被SCI期刊他引6000多次，有6篇论文被SCI评为本领域高被引论文，H因子36。主持科技部国家重点研发计划，国家自然科学基金面上项目3项、浙江省杰出青年基金，华为创新研发计划等科研项目；担任Chinese Physics Letters(CPL)、Chinese Physics B(CPB)、《物理学报》和《物理》四刊联合青年编委，《现代应用物理》青年编委，《Frontier in Materials》客座副主编，22nd 全国半导体物理年会“半导体自旋物理与拓扑现象”分会召集人等。



## 报告题目: Tunable Magnetic Anisotropy and Topological Spin Textures in a Janus $\text{MnBi}_2(\text{Se}, \text{Te})_4$ Monolayer

报告人: 米文博

天津大学 [miwenbo@tju.edu.cn](mailto:miwenbo@tju.edu.cn)

### 摘要:

Realizing and controlling topological spin textures are widely attractive for their promising applications in information and communications technology.<sup>[1]</sup> Recently, the research of the magnetism is extended to two-dimensional (2D) realm, which can provide unprecedented opportunities to study the topological magnetic properties in the 2D limit.<sup>[2,3]</sup> Using first-principles calculations and micromagnetic simulations, we propose a stable magnetic Janus monolayer  $\text{MnBi}_2(\text{Se}, \text{Te})_4$  with inherent Dzyaloshinskii-Moriya interaction to stabilize a variety of topological magnetic structures under external applied fields. Furthermore, sub-10 nm skyrmion can spontaneously form in the absence of magnetic field in  $\text{MnBi}_2(\text{Se}, \text{Te})_4$  by using van der Waals heterostructure engineering. Our results provide a promising route for controlling topological spin textures in 2D spintronic devices.

### 参考文献:

- [1] J. T. Lü, B.-Z. Hu, P. Hedegaard, M. Brandbyge, *Prog. Surf. Sci.*, 94, 21 (2019).
- [2] J. T. Lü, S. Leitherer, N. R. Papior, M. Brandbyge, *Phys. Rev. B*, 101, 201406 (2020).
- [3] B.-Z. Hu, L. L. Nian, J. T. Lü, *Chin. Phys. B*, 29, 120505 (2021).
- [4] G. Li, B.-Z. Hu, N. Yang, J. T. Lü, in preparation.

### 个人简介:

米文博, 天津大学理学院应用物理学系, 教授, 博士生导师。1997.9-2006.3 在天津大学理学院应用物理学系学习, 分别获得学士、硕士和博士学位; 2006.3-今, 天津大学理学院应用物理学系任教, 历任讲师、副教授、教授; 2008.7-9, 香港科技大学物理系访问学者; 2010.5-2011.5, 阿卜杜拉国王科技大学太阳能和可再生能源中心博士后; 2014.4-2014.6, 阿卜杜拉国王科技大学物理系访问学者。



主要从事自旋电子学材料、物理和器件方面的研究工作。以低维高自旋极化铁磁性材料及异质结构为研究对象, 以提高材料性能满足实际应用为目标导向, 以解明低维高自旋极化铁磁性材料及异质结构的磁学和自旋相关输运特性的物理机制为核心。开展了低维高自旋极化磁性材料的理论设计、高自旋极化铁磁性薄膜及异质结构的制备和物性的研究工作, 为在自旋电子学器件、光电子学器件、光催化上的应用提供重要的实验和理论依据。已在*Nat. Commun.*、*Adv. Mater.*、*Natl. Sci. Rev.*、*Adv. Funct. Mater.*、*ACS Nano*、*Adv. Electron. Mater.*、*Phys. Rev. (Appl.、B、Mater.)*、*Appl. Phys. Lett.*、*Acta Mater.*等期刊上发表论文200余篇, 2篇特邀中文综述; SCI他引4000余次。已授权发明专利9项; 多次参加国内、国际学术会议, 作邀请报告20余次; 主持国家自然科学基金6项、省部级8项; 参与国家自然科学基金委国际合作与交流重点项目2项; 获得省部级自然科学二等奖1项; 出版教材2部《自旋电子学基础》《近代物理学实验》, 专著2部《高自旋极化磁性材料》《低维磁性材料》。

## 报告题目：新型二维材料在能源领域的应用与凝聚态化学

报告人：贾然

吉林大学 [jiaran@jlu.edu.cn](mailto:jiaran@jlu.edu.cn)

### 摘要：

自石墨烯被成功合成以来，设计与合成新型二维/低维材料成为物理、化学、材料学领域内的热门课题。实验和理论研究都已经充分证明了低维度材料在能源领域内的广泛引用潜力。人们将功能性低维度材料分别应用在了太阳能电池、光催化、离子电池、超级电容等领域内，并获得了一定的成功。我们借助理论研究手段，通过对二维碳材料的修饰成功设计获得了具有巨大面内压电效应的机械能-电能转换材料。<sup>[1,2]</sup>借助非绝热动力学研究手段，我们成功的从理论的角度阐述了石墨烯增强染料敏华太阳能电池光电转化效率的微观量子机制。<sup>[3]</sup>此外，我们对二维大空洞材料的研究为海水淡化和人工膜肺的设计提供了新的思路。<sup>[4,5]</sup>在对范德华异质结的光催化产氢的理论研究过程中，我们发现，非局域的介电屏蔽效应有着不可忽视的作用。<sup>[6]</sup>这一工作恰恰契合了正在蓬勃发展中的（由吉林大学徐如人院士提出的）凝聚态化学理论。为凝聚态物理和凝聚态化学的结合提供了理论佐证和成功案例。

### 参考文献：

- [1] Yang, Tian, Chen, Eglitis, Zhang, Jia, *Appl. Surf. Sci.*, 499, 143800 (2020).
- [2] Yang, Tan, Eglitis, Bibi, Jia, Zhang, *Appl. Surf. Sci.*, 545, 148991 (2021).
- [3] Xi, Jia, Li, Wang, Bai, Eglitis, Zhang, *J. Mater. Chem. A*, 7, 2730-2740 (2019).
- [4] Zhou, Li, Fu, Wang, Fu, Kong, Bai, Eglitis, Zhang, Jia, *Nanoscale*, 12, 5055-5066 (2020).
- [5] Li, Tian, Jia, Dong, Zheng, *Nanoscale*, submitted
- [6] Yi, Wu, Pang, Jia, Xu, *Appl. Surf. Sci.*, submitted

### 个人简介：

贾然，副教授，吉林大学化学学院理论化学研究所；

个人经历：

2013-至今 吉林大学理论化学研究所 副教授

2017-至今 拉脱维亚大学固体物理研究所 客座研究员

2012-2013 德国慕尼黑工业大学，化学学院，助理研究员

2008-2011 德国伍帕塔尔大学，数学与自然科学学院，物理学博士

2002-2007 德国奥斯纳布吕克大学，物理学院，本硕连读

1998-2002 哈尔滨工业大学，材料科学与工程学院，工学学士

研究方向：低维纳米材料的设计与性能



## 报告题目：尖晶石 $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ 中本征点缺陷性质的第一性原理计算研究

报告人：王建川

中南大学 [jcw728@126.com](mailto:jcw728@126.com)

### 摘要：

尖晶石结构的  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  是一种典型的锰基正极材料，具有电压平台高(>4 V)和环境友好等优点。在其实际制备和合成过程中，材料内部往往会产生晶格点缺陷，如氧空位和阳离子反位缺陷。这些点缺陷会因改变晶格局域结构和电荷分布而影响材料的电化学性能，而对点缺陷的深入研究有助于认识缺陷与性能的关系。

采用第一性原理计算方法并基于合理的磁矩构型，<sup>[1,2]</sup>我们研究了  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  中各类本征点缺陷中与能量、结构和电荷补偿相关的性质。基于实验条件假定了相平衡条件，并分析了点缺陷在假设的平衡条件下的形成能；发现除  $8a$  位置的点缺陷外，缺陷的电荷补偿机制主要是通过调整缺陷周围 Mn 的价态完成；通过计算点缺陷之间的键能分析了缺陷之间是否会团簇化；此外，计算了氧空位和阳离子反位对锂离子迁移的影响，发现金属反位缺陷会降低锂离子的扩散能垒，而氧空位会引起离子扩散能垒的升高。

### 参考文献：

- [1] W. W. Liu, D. Wang, Z. Wang, J. Deng, and Y. Zhang, *Physical Chemistry Chemical Physics* **19**, 6481 (2017).
- [2] C. Y. Ouyang, S. Q. Shi, and M. S. Lei, *Journal of Alloys and Compounds* **474**, 370 (2009).

### 个人简介：

王建川，男，博士，中南大学副教授。2011 年受国家留学基金委资助前往德国马普钢铁研究所留学。主持国家自然科学基金和中国博士后科学基金项目，参与科技部十三五重点研发计划项目和中德合作研究小组项目等。研究领域为第一性原理计算。主要对材料的结构、点缺陷和扩散行为等性质进行计算。目前研究材料体系包括储氢材料、锂离子电池和耐磨涂层，并已在国际期刊发表论文 20 余篇。





## 报告题目：高压超导氢化物的结构设计

报告人：刘寒雨

吉林大学 [hanyuliu@jlu.edu.cn](mailto:hanyuliu@jlu.edu.cn)

### 摘要：

凝聚态物质结构的理论预测是物理、材料、地学和化学等学科长期关注的挑战性课题。基于粒子群多目标优化算法的卡里普索(CALYPSO)结构预测方法和软件,现已成为国际结构预测领域的重要方法和工具。超导现象自从 1911 年被发现以来,就以其独特的魅力吸引着广大科学家的关注。实现室温超导和其应用是人们不懈的追求目标。经过一个世纪的超导研究,但是常规 BCS 超导体的最高临界超导温度一直停留在  $\text{MgB}_2$  中的 39K。2004 年,康奈尔大学的 Ashcroft 教授通过理论提出富氢材料在高压下可能是高温 BCS 超导体。但是由于富氢材料在实验上较难合成和测量,因此理论预测富氢材料的结构和超导显得十分重要。利用 CALYPSO 程序对镧系金属氢化物展开了系统的理论研究,发现  $\text{LaH}_{10}$  和  $\text{YH}_{10}$  在高压下可能具有更高的超导转变温度,甚至可能变为室温超导体。

### 个人简介：

刘寒雨,吉林大学物理学院教授,中组部海外高层次人才引进计划青年项目入选者,长期致力于极端高压强下凝聚态物质的结构与性质研究,设计了超导临界温度超过 200K 的高压相超导体,预言了压致固体氢的新奇离子传播行为,破解了系列高压相结构难题等,部分结果得到了实验证实,发表第一/通讯作者论文 50 余篇,含 Nat.



Commun. 1 篇, PRL 4 篇, PNAS 4 篇。所有文章引用 6000 余次, H 因子 40, 12 篇文章入选了 ESI 高被引论文。获第四届极端条件下物质与辐射国际会议“MRE 青年科学家奖”。

## 报告题目：Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 体相、表面及纳米粒子亚铁磁体系的第一性原理研究

报告人：柳洪盛

大连理工大学 [liuhongsheng@dlut.edu.cn](mailto:liuhongsheng@dlut.edu.cn)

### 摘要：

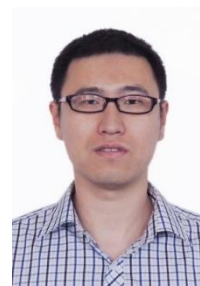
Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 纳米粒子在纳米医学上具有重要的应用，如药物运输、核磁共振、磁热疗、生物分离等。<sup>[1]</sup>然而 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 纳米粒子的量化模拟研究却因其模型过于复杂、计算量过大而一直裹足不前。为此我们针对 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 体系，从体相到表面进行了系统的第一性原理研究，指出由于电荷密度的对称性破缺，立方相 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 是半导体而非半金属，解释了实验上观察到的非 100% 自旋极化电流。<sup>[2]</sup>提出表面水吸附会影响 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001) 表面不同相的相对稳定性。<sup>[3]</sup>基于以上研究拟合了适用于 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 体系的密度泛函紧束缚近似 (DFTB) 参数，<sup>[4]</sup>再结合 DFTB 和 DFT 计算，实现了实际大小 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 纳米粒子的量化模拟，指出了纳米粒子表面的重构机理。<sup>[5]</sup>进一步我们用多尺度模拟的方法研究了 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001) 表面和球形纳米粒子与水溶液的相互作用，<sup>[6-7]</sup>指出水溶液对纳米粒子的结构和性质的影响。<sup>[7]</sup>

### 参考文献：

- [1] Colombo, M., et al. Biological applications of magnetic nanoparticles, *Chem. Soc. Rev.* 2012, **41**, 4306-4334.
- [2] 柳洪盛, C. Di Valentin. Band Gap in Magnetite above Verwey Temperature Induced by Symmetry Breaking, *J. Phys. Chem. C*, 2017, **121**, 25736-25742.
- [3] 柳洪盛, Di Valentin. C. Nanoscale, Bulk-terminated or reconstructed Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001) surface: water makes a difference *Nanoscale*, 2018, **10**, 11021.
- [4] 柳洪盛, G. Seifert, C. Di Valentin\*. An efficient way to model complex magnetite: Assessment of SCC-DFTB against DFT, *J. Chem. Phys.* 2019, **150**, 094703.
- [5] 柳洪盛, C. Di Valentin\*. Shaping magnetite nanoparticles from first principles. *Phys. Rev. Lett.*, 2019, 123, 186101.
- [6] 柳洪盛, E. Bianchetti, P. Siani, C. Di Valentin\*. Insight into the interface between Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001) surface and water overlayers through multiscale molecular dynamics simulations. *J. Chem. Phys.* 2020, **152**, 124711.
- [7] 柳洪盛, P. Siani, E. Bianchetti, 赵纪军, C. Di Valentin\*, Multiscale simulations of the hydration shells surrounding spherical Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles and effect on magnetic properties, *Nanoscale*, 2021, **13**, 9293.

### 个人简介：

柳洪盛，毕业于大连理工大学物理学院，现于大连理工大学物理学院任副教授，凝聚态物理专业。主要从事低维材料的结构、生长以及电磁学性质的第一性原理计算研究。研究对象包括硅烯、硼烯、单层过渡金属硫属化合物、CrI<sub>3</sub> 等二维材料和 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 纳米粒子。已在 *Phys. Rev. Lett.*、*ACS Nano* 等刊物发表 SCI 论文 30 余篇，ESI 高被引论文 3 篇，他引 1500 余次，H 因子 15。主持国家自然科学基金青年基金 1 项。荣获 2016 年教育部自然科学奖二等奖 (4/8)，2018 辽宁省优秀博士学位论文奖，2019 年辽宁省自然科学二等奖 (3/5)，大连市高端人才。



## 报告题目：高熵合金的第一性原理计算研究

报告人：张华磊

西安交通大学 [hualei@xjtu.edu.cn](mailto:hualei@xjtu.edu.cn)

### 摘要：

高熵合金(high-entropy alloys, HEAs) 的多主元设计理念突破了以一种或两种元素为主的传统合金，其种类远远超过传统合金。实验证实 CrMnFeCoNi 高熵合金是具有顺磁性的面心立方结构的固溶体单相，优异的力学性能使其具有良好的应用前景。优化合金组元及其配比是设计和筛选高性能合金的关键，实验试错法耗资大且低效，如何快速高效地研究无限可能的高熵合金成分组合，成为一种挑战。精确的 muffin-tin 轨道(exact muffin-tin orbitals, EMTO)和相干势近似(coherent potential approximation, CPA)相结合的方法能够高效准确地描述高熵合金中的化学无序和磁性无序。因此，我们利用第一性原理 EMTO-CPA 方法计算研究了合金化效应对 CrMnFeCoNi 高熵合金的相稳定性和弹性性能的影响，在电子层次上揭示影响弹性和力学性能的微观机制；为进一步研究高熵合金的脆韧性和固溶强化效应提供了必要参数。并通过计算研究中熵合金和高熵合金的层错能建立了层错能与变形强化机制之间的定量关系。

### 个人简介：

张华磊，西安交通大学前沿科学技术研究院，副教授，主要从事计算材料学方面的研究，集中于传统合金和高熵合金的第一性原理计算和设计优化，研究方向包括合金的设计优化、合金相变机制研究和高性能结构材料设计等。已在 *Acta Materialia* 等期刊发表论文 40 余篇。主持国家自然科学基金面上项目和青年项目各 1 项，主持 1 项留学回国基金，并作为研究骨干参与 973 项目和国家重点研发计划等。



## 报告题目：PWmat 在纳米、能源材料计算中的应用

报告人：田洪镇

北京龙讯旷腾科技有限公司 [tianhongzhen@pwm.com](mailto:tianhongzhen@pwm.com)

### 摘要：

本次报告主要讨论 PWmat 在纳米材料和能源材料计算模拟中的应用，包括 Charge Patching Method (CPM)在莫尔条纹计算方面的应用；fixed-potential 方法在电化学计算方面的应用；散射态方法在器件量子输运方面的应用。CPM 是一个特别强大的超大体系模拟工具，可以用于研究纳米结构，例如量子点和纳米线，也可以用于研究现在比较热门的莫尔条纹。PWmat 的 solvent model 模块可以进行溶剂效应模拟，可以应用于锂电池以及催化反应等的研究，而且 PWmat 还可以对反应电极施加一个固定的电极电势，所以采用 solvent model + fixed-potential，可以模拟更加真实的电极反应。PWmat 还提供了全新的量子输运计算模块，该模块采用散射态理论计算量子输运，与算法复杂度规模在  $O(N^3)$ 的 NEGF 方法不同，这种散射态方法可以直接计算给定能量的散射态，而且精度是平面波级精度。除了这种散射态方法，目前还没有其他任何方法可以使用平面波赝势方法来计算量子输运和散射态。

### 个人简介：

田洪镇 2017 年 3 月毕业北京航空航天大学，具有多年材料模拟经验，在国内外期刊上发表多篇 SCI 论文，其中包括一篇 AEM、两篇 PNAS 等。自 2017 年至今就职于北京龙讯旷腾科技有限公司，主要负责软件性能测试、售前技术支持、软件推广和宣传以及高性能集群实施。



## 报告题目：基于密度泛函方法的锂硫电池催化材料理论研究

报告人：张琪

合肥工业大学 [zhangq@hfut.edu.cn](mailto:zhangq@hfut.edu.cn)

### 摘要：

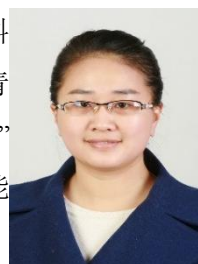
锂硫电池是新一代高能量密度、环境友好、安全价廉的电池体系。穿梭效应和死硫问题，严重阻碍其实现高硫载量商业化要求。吸附材料能够通过捕获多硫化物缓解上述问题，但不能根本解决；催化材料有助于增强电化学反应动力学，从根本上阻止多硫化物穿梭和死硫的出现。通过密度泛函方法理论计算，在阐明催化机制及构效关系的基础上预测高效催化材料，是拓展锂硫电池中新型催化材料的重要途径。本研究针对锂硫电池中典型的催化材料，金属硫化物  $\text{MoS}_2$ <sup>[1]</sup>，金属碳化物  $\text{Ti}_2\text{C}$ <sup>[2]</sup>，金属氧化物  $\text{La}_2\text{O}_3$ <sup>[3]</sup>，从吸附、迁移、电子结构、充放电动力学等角度出发深入阐明催化作用机制，提出了充放电过程“锂化-迁移-裂解”机理，明确了决速步骤和关键构效关系<sup>[4-6]</sup>。基于此提出针对黑磷<sup>[7]</sup>、金属硒化物的材料改性策略，预测 B 掺杂黑磷和高空位浓度 Se 缺陷有助于提升催化性能。该研究为推进锂硫电池中催化材料发展提供理论依据与指导，助力锂硫电池尽快满足高硫载量且稳定安全的市场要求。

### 参考文献：

- [1] Q Zhang,\* X.-F. Zhang, M. Li, J.-Q. Liu, Y.-C. Wu, Sulfur-deficient  $\text{MoS}_{2-x}$  promoted lithium polysulfides conversion in lithium sulfur battery: A first-principles study. *Appl. Surf. Sci.*, **2019**, 487, 452.
- [2] Q. Zhang, X.-F. Zhang, Y.-H. Xiao, C. Li, H.-H. Tan, J.-Q. Liu,\* Y.-C. Wu,\* Theoretical Insights into the Favorable Functionalized  $\text{Ti}_2\text{C}$ -Based MXenes for Lithium-Sulfur Batteries. *ACS Omega*, **2020**, 5, 29272.
- [3] X.-F. Zhang, M.-S Chen, Q Zhang,\* J.-Q. Liu, \* Y.-C. Wu, \* New insights into synergistic effects of  $\text{La}_2\text{O}_3$  and nitrogen doped carbon for improved redox kinetics in lithium-sulfur batteries: a computational study. *Appl. Surf. Sci.*, **2021**, Accepted.
- [4] J.-Q. Liu, M. Li, X.-F. Zhang, Q. Zhang,\* J. Yan, Y.-C. Wu, Dithiothreitol-assisted polysulfide reduction in the interlayer of lithium-sulfur batteries: a first-principles study *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2019**, 21, 16435.
- [5] C. Li, X.-F. Zhang, Q. Zhang,\* Y.-H. Xiao, Y.-Y. Fu, H. H. Tan, J.-Q. Liu, Y.-C. Wu, Theoretical understanding for anchoring effect of MOFs for lithium-sulfur batteries. *Comput. Theor. Chem.*, **2021**, 1196, 113110.
- [6] M.-S Chen, H.-R. Zhang, Q Zhang,\* J.-Q. Liu, Y.-C. Wu, First-principles Study on the Catalytic Effect of Co, P Co-doped  $\text{MoS}_2$  in Lithium-sulfur Batteries. *Chem. J. Chemistry. U.*, doi: 10.7503/cjcu20210110
- [7] Q. Zhang,\* Y.-H. Xiao, Y.-Y. Fu, C. Li, X.-F. Zhang, J. Yan, J.-Q. Liu,\* Y.-C. Wu, Theoretical prediction of B/Al-doped black phosphorus as potential cathode material in lithium-sulfur batteries. *Appl. Surf. Sci.*, **2020**, 512, 145639.

### 个人简介：

张琪，合肥工业大学工业与装备技术研究院，讲师。2017年，中国科学技术大学有机化学专业，获理学博士学位。主持承担国家自然科学基金青年项目，合肥工业大学“学术新人”等多项纵横向项目。合肥工业大学“111”学科创新引智基地（清洁能源新材料与技术）国内骨干成员。主要从事储能体系中催化材料及电催化反应的理论研究，在 *ACS Catalysis*、*Nanoscale*、*Applied Surface Science* 等国际学术期刊上发表研究论文三十余篇。





**报告题目: Machine learning and Simple descriptors for high activity and selectivity bimetallic atomic catalysts towards CO<sub>2</sub>RR**

**报告人: 姚赛**  
南开大学 [1875754855@qq.com](mailto:1875754855@qq.com)

**摘要:**

Electroreduction CO<sub>2</sub> can convert CO<sub>2</sub> into value-added chemicals, which provides an attractive solution for carbon neutralization. The key factor is how to find the ideal catalysts. In this work, via density functional theory (DFT) computations and machine learning (ML), we studied CO<sub>2</sub>RR catalyzed by dual-metal-site in four N-doped graphene. The results show that the reduction products are highly related to the types of N-doped graphene. By establishing linear relationships, we found that the adsorption free energies of various intermediates can be estimated by two key parameters,  $\Delta G_{\text{HCOO}^*}$  and  $\Delta G_{\text{COOH}^*}$ , thereby helping us to identify the potential-determining step and overpotential. We also proposed efficient descriptor to quickly obtain the values of  $\Delta G_{\text{HCOO}^*}$  and  $\Delta G_{\text{COOH}^*}$ , which greatly improves the calculation efficiency. This work provides guidance for the exploration of promising electrocatalysts for CO<sub>2</sub>RR. Machine learning combined with simple descriptors also provides a reference for the search of electrocatalysts in other fields.

**参考文献:**

- [1] Ferrin, P. & Mavrikakis, M., *J. Am. Chem. Soc.*, 131, 14381-14389 (2009).
- [2] Chen, A., Zhang, X. & Zhou, Z., *InfoMat*, 2, 553-576 (2020).

**个人简介:**

Sai Yao received her bachelor's degree in 2017 from Yanshan University, China. She is currently studying for her PhD in Professor Zhen Zhou's group at Nankai University, China. Her research focuses on computational investigation of energy storage materials and devices.



## 报告题目：钙钛矿型复合光催化材料的界面结构与反应微观机制

报告人：周新

大连大学 [zhouxin@dlu.edu.cn](mailto:zhouxin@dlu.edu.cn)

### 摘要：

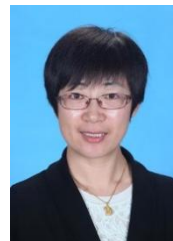
通过半导体光催化分解水(光解水)反应实现太阳能向氢能转化,是解决能源危机和环境污染的理想途径之一。目前光解水体系的主要问题是太阳能转换效率低、难以工业化应用,其主要原因是反应过程中捕光、电荷分离和传输、表面催化反应三方面的效率低或不能同时具有较高效率。研究发现,在构建复合光催化材料,如半导体表面负载助催化剂,搭建异质结构等可以显著提高反应体系转换效率。然而,此类材料中各组元间的相互作用和光生电荷传输很难从实验上进行观测,其作用机制尚不明确。本文围绕上述关键性科学问题,运用密度泛函方法,选取高活性的钙钛矿型光解水体系  $\text{NaTaO}_3$ ,  $\text{SrTiO}_3$ ,  $\text{KTaO}_3$ , 研究复合体系的界面结构、光电性质、热力学稳定和光生载流子传输等。计算结果表明,复合光催化体系中两组元之间电荷密度及静电势的差异作为驱动力,促进电子和空穴向界面不同区域的转移,有利于延长光诱导载流子的寿命。助催化剂在体系中的功能与界面处两组元的端基结构有密切关系。我们的理论工作从微观层面上对实验现象给予合理解释,为高效光催化体系的优化和构筑提供理论依据。

### 参考文献：

- [1] M. Wang, Y. Ma, Y. Fo, Y. Lyu, X. Zhou, *Int. J. Hydrogen Energ.*, **2020**, 45, 19357.
- [2] Y. Fo, M. Wang, Y. Ma, H. Dong, X. Zhou, *J. Solid. State Chem.*, **2020**, 292, 121683.
- [3] Y. Ma, Y. Fo, M. Wang, X. Liang, H. Dong, X. Zhou, *J. Energ. Chem.*, **2021**, 56, 353.

### 个人简介：

周新,大连大学环境与化学工程学院,教授,辽宁省“百千万人才工程”百人层次人选,辽宁省化工协会太阳能光催化专委会委员。多年来以光电材料的结构设计和研发为研究方向,与实验工作者密切合作,研究各种半导体材料的晶体结构、载流子迁移、电子-声子相互作用、反应机理和构效关系。主持国家、省市级项目十余项,截至目前,共发表SCI收录论文110余篇,其中作为第一/通讯作者发表近70篇,包括 *Nature Commun.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Adv. Mater*等。受邀分别在国际知名杂志 *ChemCatChem* 和 *J. Energ. Chem.*上撰写关于光催化分解水体系中光生载流子传输和钙钛矿电池材料设计的研究进展综述。两项代表性成果作为杂志封面发表于能源材料领域知名期刊 *ACS Appl. Energ. Mater.*和 *J. Energ. Chem.*。



## 报告题目：GaS/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 异质结光电特性的第一性原理研究

报告人：崔真

西安理工大学 [zcui@xaut.edu.cn](mailto:zcui@xaut.edu.cn)

### 摘要：

类石墨相氮化碳(g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>)是一种新型非金属半导体材料，具有可见光响应强、热稳定性和化学稳定性高等优点，在水分解制氢、降解有机物、气体传感、光电器件和二氧化碳还原等领域具有极大的应用潜力。本文利用密度泛函理论，研究了 GaS/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 范德华异质结构的电子和光学特性。构建不同模型 GaS/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 的异质结构，对比其形成能，并用分子动力学方法计算证明了它的稳定性。稳定的 GaS/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 范德华异质结构是一种 I 型能带对准的间接带隙半导体。Bader 电荷研究表明，GaS 作为受主，g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 作为施主。分析了双轴应变和垂直电场对电子和光学性能的影响。双轴应变和垂直电场都能调节异质结构带隙的值。有趣的是，当施加双轴应变和垂直电场时，GaS/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 异质结的能带结构可以从 I 型向 II 型转换。II 型能带对准可用于光催化、光电池和光伏研究。此外，在双轴应变下 GaS/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 异质结构在可见光区具有较强的吸收峰，有利于可见光的光催化。以上结果表明，GaS/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 异质结构在光电器件和光催化领域具有巨大的应用潜力。

### 个人简介：

崔真，博士，副教授，硕士研究生导师，西安理工大学“青年科技新星”，西安理工大学“优秀青年教师”，*Journal of Materials Chemistry A*、*Applied Surface Science*、*Solar Energy Materials & Solar Cells*、*International Journal of Energy Research* 等国内外知名期刊审稿人。主要研究方向为新型光电器件及气体传感器设计。先后主持国家自然科学基金 1 项、中国博士后基金面上项目 1 项、陕西省自然科学基金 2 项，陕西省教育厅科研计划项目 1 项。近五年，在 *Applied Physics Letters*、*Nanotechnology*、*Applied Surface Science*、*Materials & Design*、*Physica E*、*Vacuum* 等期刊发表了相关实验和理论计算的 SCI 论文 50 余篇，其中第一作者/通讯作者 30 余篇，ESI 高被引论文 4 篇，ESI 热点论文 1 篇，申请发明专利 2 项。



## 报告题目：非金属催化剂用于高效一氧化氮还原产氨

报告人：吴倩

山东大学 764156403@qq.com

### 摘要：

$\text{NH}_3$  是肥料，铵盐，纤维和塑料的重要组成部分，而  $\text{NO}$  是主要的大气污染物和废水污染物的成分之一。 $\text{NH}_3$  的合成和  $\text{NO}$  的去除是目前电化学中最具吸引力和挑战性的两个过程。当前的研究工作主要集中在它们中单个反应过程，而对将  $\text{NO}$  直接电化学还原为  $\text{NH}_3$  的研究较少。这里，我们提出了一种不含金属的电催化剂，即掺杂 P 原子的单层  $\text{C}_2\text{N}$ ，作为将  $\text{NO}$  直接电还原为  $\text{NH}_3$  的有潜力的电催化剂。我们分别在  $\text{C}_2\text{N}$  中掺杂单个和两个 P 原子，我们的结果表明，双 P 掺杂的  $\text{C}_2\text{N}$  ( $2\text{P}@C_2\text{N}$ ) 表现出更加优异的催化活性和高选择性，这与 P 原子的  $\text{sp}^3$  杂化有关。此外，我们的微观动力学模型分析表明，在 400 K 时， $2\text{P}@C_2\text{N}$  上  $\text{NO}$  还原为  $\text{NH}_3$  的转换频率高达  $8.9 \times 10^5/\text{s}/\text{site}$ ，表明它具有超快的反应速率，并且该反应速度比之前的  $\text{N}_2$  还原产氨和工业 Haber-Bosch 产氨的反应速率要高得多。我们的研究不仅首次提供了一种去除  $\text{NO}$  的不含金属的电催化剂，而且为氨合成提供了有效的替代途径。

### 个人简介：

吴倩, 2017 年本科毕业于山东师范大学获得学士, 现于山东大学物理学院硕博连读, 博士二年级, 导师为戴瑛教授, 合作导师为马衍东教授。目前的研究主要集中在通过第一性原理方法模拟材料的电子行为和电催化性质。近年来作为第一作者在 *Journal of Materials Chemistry A*、*ACS Applied Materials Interface*、*The Journal of Physical Chemistry C*、*Journal of Physics D: Applied Physics* 期刊发表学术论文 8 篇, 其中影响因子大于 10 的 3 篇。



报告题目：二维反-范特霍夫/勒贝尔阵列  $\text{AlB}_6\text{-ptAl-array}$  纳米片，具有很高的稳定性、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

报告人：宋冰宜

华中科技大学 [bingyisong@126.com](mailto:bingyisong@126.com)

摘要：

借助高性能计算日益强大的计算能力和预测能力，将晶体结构搜索与第一性原理计算和分子动力学模拟相结合，系统深入地研究了二维  $\text{AlB}_6$  纳米片的晶体结构、电子结构、稳定性、力学性质、超导电性、化学键。研究表明 2D  $\text{AlB}_6$  纳米片是一种极具前景且非常罕见的新型二维材料。全局最稳定结构  $\text{AlB}_6\text{-ptAl-array}$  是一个极其罕见的平面四配位铝(ptAl)阵列夹在两个褶皱硼单层之间所形成的规整有序、紧密排列的高度稳定结构，分子动力学模拟表明  $\text{AlB}_6\text{-ptAl-array}$  可在高温(2080K)下稳定存在。力学性能比石墨烯优越，其面内杨氏模量比石墨烯大很多，电子结构计算表明： $\text{AlB}_6\text{-ptAl-array}$  是金属性材料，狄拉克费米子，具有三重狄拉克锥和狄拉克节点环。更意外的是， $\text{AlB}_6\text{-ptAl-array}$  具有超导电性， $T_c$  为 4.7 K，且在 12% 的拉伸应变下， $T_c$  大大升高到达 30 K，远高于液氢的温度。化学键分析表明铝和硼之间主要为离子键，也包含一部分共价键，但是硼和硼之间主要是共价键。除了全局最稳定结构  $\text{AlB}_6\text{-ptAl-array}$  之外，我们还预测了一系列亚稳态结构，分子动力学模拟和声子谱计算表明这些亚稳态结构能够稳定存在。总的来说，二维  $\text{AlB}_6$  纳米片呈现丰富的结构多样性，其化学环境有多种配位模式(包括四、五、六、七、八)。这些优异性能为二维  $\text{AlB}_6$  纳米结构通向纳米电子学和纳米力学、甚至超导的应用奠定基础。非常高的稳定性预示着这些新预测的  $\text{AlB}_6$  二维纳米片结构有望在实验上被制备出来，并用于纳米电子器件，力学器件，超导体等相关领域。该工作为二维铝硼材料开辟了一个新分支，同时，也为二维反-范特霍夫/勒贝尔阵列的研究开辟了一个新领域。

参考文献：

[1] Bingyi Song, Yuan Zhou, Hui-Min Yang, Ji-Hai Liao, Li-Ming Yang,\* Xiao-Bao Yang, and Eric Ganz, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141, 3630–3640.

个人简介：

宋冰宜，华中科技大学化学与化工学院博士后，合作导师为杨利明教授。主要从事新型二维材料晶体结构、电子结构及物理化学性质的理论研究，发表论文 *J. Am. Chem. Soc.* 一篇。





**报告题目：Anti-MXenes from Non-van der Waals Bulks for Electrochemical Applications: The Merit of Metallicity and Active Basal Plane**

**报告人：顾金星**

波多黎各大学 *jinxinggu@qq.com*

**摘要：** Two-dimensional transition-metal compounds (2DTMCs) are promising materials for electrochemical applications, but 2DTMCs with metallicity and active basal planes are rare. In this work, we proposed a simple and effective strategy to extract 2DTMCs from non-van der Waals bulk materials and established a material library of 79 2DTMCs, which we named as anti-MXenes or XMenes (pronounced as “cross-meens”), since they are composed of one M atomic layer sandwiched by two X atomic layers. Out of the 79 anti-MXenes, we have computationally identified 24 structures which have good thermodynamic, dynamic, mechanical, and thermal stabilities. Their intrinsic metallicity and active basal plane endow them with advantages for electrochemical applications in addition to opportunities for unconventional superconductivity. The metallicity and active basal plane endow these anti-MXenes with potential as excellent electrode materials, for example, as electrocatalysts for hydrogen evolution reactions (HER). Among the noble-metal free anti-MXenes with favorable H-binding, CuS can boost HER at the whole range of H coverages, while CoSi, FeB, CoB, and CoP show promise for HER at some specific H coverages. The active sites are the tetra-coordinating nonmetal atoms at the basal planes, thus rendering a very high density of active sites for these materials. CoB is also a promising anode material for lithium-ion batteries, showing low Li diffusion energy barriers, a very high capacity, and a suitable open circuit voltage. This work promotes the “computational exfoliation” of 2D materials from non-van der Waals bulks and exemplifies the applications of anti-MXenes in various electrochemical processes.

**个人简介：**

顾金星，于 2015 年取得南京师范大学材料与科学学院化学学士学位，随后师从美国波多黎各大学化学系陈中方教授，于 2020 年 12 月取得博士学位。博士期间主要从事新型二维材料的设计、优异的氧还原/析氧反应和氮气还原反应的电化学催化剂的设计等方面的研究。截至 2021 年 7 月，作为第一作者和合作者在 ACS Nano, Small Methods, Journal of American Chemical Society, Energy & Environmental Science 等杂志发表文章共 20 篇，总引用数为 982，h-index 为 11。



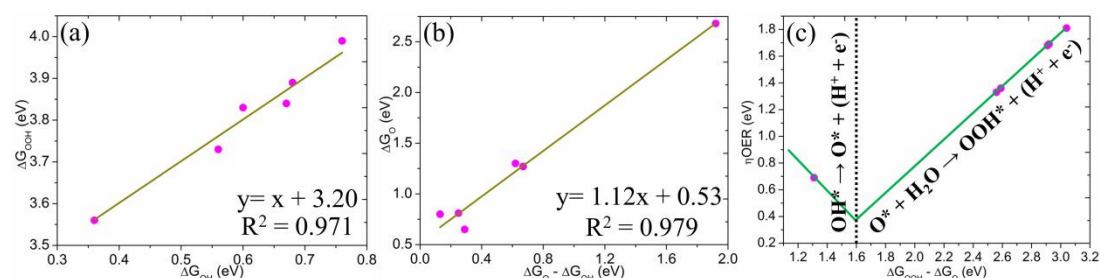
## 报告题目: Doped carbon materials for oxygen electro-catalysis

报告人: 张喜林

河南师范大学 [xlzhang828@126.com](mailto:xlzhang828@126.com)

## 摘要:

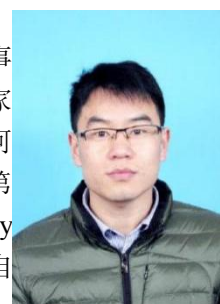
The bifunctional catalysts for both oxygen reduction reaction (ORR) and oxygen evolution reaction (OER) are of importance to the development of electrochemical energy systems such as reversible fuel cells, metal-air batteries, and water electrolyzers. Here, using the first-principles methods based on density functional theory (DFT), the Co and N codoped graphene systems (CoNx-gra,  $x = 1 - 4$ ) with high ORR activity were further suggested as efficient OER catalysts. It was found that the activity on Co site of CoNx-gra towards ORR and OER would be affected by both the N-dopant concentration and configuration. The extrapolated overpotential of 0.37 V for either ORR or OER on CoNx-gra systems is comparable to those of noble metal benchmark catalysts. The origin of the activity stems from moderate hybridization between Co 3d orbital and p-orbital from O species, governed by the neighboring N coordination environment. Our results highlight the potential application of transition metal and non-metal codoped graphene as efficient non-precious bifunctional catalysts.



**Fig. 1** The scaling relationship between  $\Delta\text{GOOH}^*$  and  $\Delta\text{GOH}^*$  (a),  $\Delta\text{GO}^*$  and  $(\Delta\text{GO}^* - \Delta\text{GOH}^*)$  (b), and the reverse volcano plot of  $\eta_{\text{OER}}$  vs  $(\Delta\text{GOOH}^* - \Delta\text{GO}^*)$  on CoNx-gra (c).

## 个人简介:

张喜林, 博士, 河南师范大学物理学院讲师, 硕士生导师。主要从事凝聚态物理计算模拟、新能源材料的模拟设计与实验合成, 主持在研国家自然科学基金青年项目一项, 中国博士后科学基金面上二等资助一项, 河南省联合基金重点项目子项目一项。在表面与界面理论模拟研究方面以第一作者(含共同第一作者)或通讯作者发表包括 *Adv. Mater.*, *Adv. Energy Mater.*, *Small*, *Nanoscale* 等在内的 SCI 论文 26 篇。项目成果获河南省自然科学二等奖一项。



## 报告题目：固体材料中的拓扑声子态

报告人：郑宝兵

宝鸡文理学院 [zbb1223@163.com](mailto:zbb1223@163.com)

### 摘要：

固体材料中晶体空间对称性要比高能物理中约束基本粒子的庞加莱对称丰富许多，因此近年来，在固体材料中寻找并且设计非传统准粒子已经成为凝聚态物理非常受关注的研究领域。特别是，由于不受泡利不相容原理的限制，相比电子体系，固体材料中的声子为实现各种新奇的非传统准粒子提供了非常优异的平台。本报告主要介绍两类在固体材料的声子里实现的非传统准粒子。一类是第三类的节点环声子，主要介绍第三类节点环的概念和基本原理，并且讨论如何在晶体材料里面实现第三类节点环，此外也给出了设计第三类非传统准粒子的普适方法。另一类是我们提出了由点式对称操作和非点式对称操作共同保护的沙漏型色散的一般方案，这与传统的沙漏型准粒子的对称保护机制不同，并且在固体材料的声子中实现了这一新奇的准粒子色散。

### 个人简介：

郑宝兵，副教授，宝鸡文理学院横渠学者。2005年毕业于西北大学物理学基地班，2007-2010年在四川大学获得硕士学位，2011-2015年在兰州大学获得博士学位，2018-2020年在南方科技大学/武汉大学从事博士后研究工作。近年来主要基于第一性原理方法和紧束缚模型开展拓扑半金属和拓扑声子等相关理论研究，同时关注二维功能材料的高通量计算等方面的研究工作。在 PRL、PRB、npj Comput. Mater.、JPCL 等国际权威学术刊物上发表 SCI 学术论文 40 余篇，主持国家自然科学基金理论物理专项 1 项、中国博士后基金 1 项、陕西省自然科学基金项目 1 项。获得陕西省科学技术奖三等奖 1 项、陕西省自然科学优秀学术论文三等奖 1 项、宝鸡市自然科学优秀学术成果奖二等奖 1 项。



## 报告题目：非对称二维材料的二阶非线性光学响应

报告人：魏亚东

哈尔滨工业大学 weiyd@hit.edu.cn

### 摘要：

低维材料是一类潜在的高效易集成的非线性光学器件组分材料，但是二维材料对称性普遍较高，难以对入射光进行高效的非线性吸收。在本报告中，我们在二维材料的面内和面外引入自发对称性破缺，研究其对二阶非线性光学性质的影响。首先，研究了面内对称性破缺的影响。通过紧束缚模型计算，发现双轴应变改变了单层 GeS 和 SnS 带隙，进而对其位移电流响应产生了明显的影响。发现了横向电场的引入，在锯齿形石墨烯纳米带上诱导了位移电流和注入电流响应的产生，并且对电流响应具有非线性的调控。通过独立电子近似和态求和方法计算，发现黑磷相二元磷族单层材料 $\alpha$ -PAs 单层的面内二阶非线性极化率可高达  $8000 \text{ pmV}^{-1}$ 。其次，研究了面外对称性破缺的影响。相比  $\text{MoS}_2$ ，Janus  $\text{MoSSe}$  面外对称性破缺使其非零独立二阶非线性张量元数量增加，克服了过渡金属硫族体块材料二次谐波响应层数相关的不足。我们还发现 Janus  $\text{Ga}_2\text{SSe}$  的面外二阶非线性极化率比其面内极化率大 1-2 个数量级。此外，我们讨论了对称性破缺的引入，对二维材料激子性质的影响。综上所述，在低维材料面内和面外分别引入对称性破缺，是一类设计高性能可集成非线性光学器件的候选材料的重要途径。

### 参考文献：

- [1] Wei Y, Xu X, Wang S, et al. Second Harmonic Generation in Janus  $\text{MoSSe}$  a Monolayer and Stacked Bulk with Vertical Asymmetry[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2019, 21(37): 21022-21029.
- [2] Wei Y, Wang S, Pang K, et al. Large and Anisotropic Second Harmonic Generation of V-V Binary Phosphorene Derivative with Permanent Dipole[J]. *Journal of Materials Chemistry C*, 2021, 9, 6544-6552
- [3] Kaner N T, Wei Y, Jiang Y, et al. Enhanced Shift Currents in Monolayer 2D GeS and SnS by Strain-Induced Band Gap Engineering[J]. *ACS omega*, 2020, 5(28): 17207-17214.
- [4] Wei Y, Cheng J, Li W et al. Electric field induced injection and shift currents in zigzag graphene nanoribbons. arXiv:2106.04977 (2021)
- [5] Pang K, Wei Y, Xu X, et.al. Giant Out-of-Plane Second Harmonic Generation Susceptibility in Janus Group III Chalcogenide Monolayers[J]. *The Journal of Physical Chemistry C* 2021, 125, 20, 11285–11293
- [6] Wei Y, Jiang Y, Pang K, et al. Long Radiation Lifetime and Quasi-Isotropic Excitons in Antioxidant V-V Binary Phosphorene Allotropes with Intrinsic Dipole[J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2020, 124:14787-14796.

### 个人简介：

魏亚东，2021 年博士毕业于哈尔滨工业大学物理学院。同年到哈尔滨工业大学材料科学与工程学院博士后。主要从事二维材料非线性光学的第一性原理计算方面的研究。攻读博士期间曾参与国家自然科学基金面上项目(11974091)的研究工作。至今已发表 8 篇 SCI 论文。

#### 学习经历：

2011/9-2015/6：哈尔滨工业大学，应用物理学，学士

2015/9-2021/4：哈尔滨工业大学，物理学，博士



第十三届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会 O012

报告题目：基于团簇组装设计磷基纳米材料

报告人：王淑凯

内蒙古大学 wangshukai0323@163.com

### 摘要：

“自下而上”是设计具有特定性能纳米材料的有力方法。通过第一性原理计算，我们系统地研究了由  $P_n$  亚基( $n = 2, 8$ )组装的纳米线(NW)、过渡金属原子掺杂 1D- $P_{10}$  组装的磷纳米线的结构、稳定性、磁性和电子性质。我们的计算表明，组装的 1D- $P_{10}$  NW 在热力学、动力学、热学和化学方面都是稳定的。此外，当它被过渡金属原子(TM = Ti~Zn, Zr~Mo)修饰时，会发生向三明治或准三明治链的结构转变，并引入各种磁性和电子特征。特别地，1D- $Mn_2@P_{10}$  和 1D- $V_1@P_5$  分别是铁磁半导体和铁磁半金属。进一步地，我们使用  $P_8$  和  $N_2$  作为组装单元来构建一维纳米线和二维纳米片(NS)，通过计算讨论了这些组装纳米材料的稳定性、电子和磁性。组装的 1D- $P_8N_2$  NW 和 2D- $P_8N_4$  NS 也具有良好的稳定性。2D- $P_8N_4$  NS 是一种直接带隙半导体，1D- $P_8N_2$  NW 是一种间接带隙半导体，锰掺杂可以将其转化为稀磁半导体，在自旋上升通道中有一个狄拉克锥。我们的理论研究提出了几种超稳定的一维磷纳米线，也为获得具有不同磁性和电子性质的  $P_5$ -TM- $P_5$ -TM 链提供了一种可行的途径。

### 个人简介：

王淑凯，2019 年于内蒙古大学获得理学学士学位，目前是内蒙古大学物理科学与技术学院 2019 级在读硕士，导师为李锋钰研究员。研究方向主要是基于第一性原理计算低维材料的电学、磁学等性质，并通过掺杂等手段设计具有电磁性质的功能器件。现已在 Nanoscale 和 Nano Express 各发表论文一篇，获得 2019 年研究生学业奖学金，2020 年国家奖学金。





## 报告题目：钙钛矿光生载流子动力学理论计算

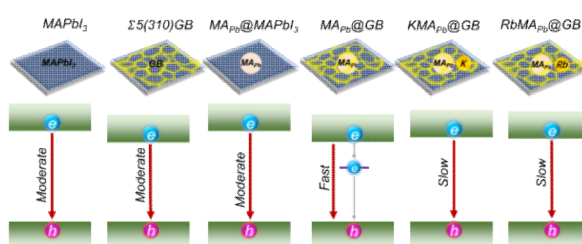
报告人：乔璐 龙闰\*

北京师范大学 201721150057@mail.bnu.edu.cn

### 摘要：

太阳能的有效利用是解决能源危机和环境问题的重要途径之一。近年来，金属卤素钙钛矿太阳能电池由于其高光电转换效率和低廉的价格成为该领域学术界和工业界关注的热点。为了进一步提高钙钛矿太阳能电池的光电转换效率，必须深刻理解其光生电荷的动力学过程。光生电荷的产生、分离、弛豫与复合通常是发生在飞秒-皮秒超快时间尺度的非绝热过程。尽管超快光谱实验技术在此领域已经取得了一定突破，但相关动力学微观机理的深入解释和性能的前瞻性预测的理论计算研究不可或缺。

本研究以常见的面缺陷-晶界作为研究对象，聚焦缺陷及其钝化对钙钛矿光电转化效率的影响。实验上关于晶界对钙钛矿光电转化效率存在有利或有害影响的争议。通过研究发现单纯的晶界对钙钛矿载流子寿命没有显著影响，晶界与点缺陷的共同作用是限制钙钛矿光伏性能的主要原因。而通过碱金属掺杂可有效钝化晶界处点缺陷，抑制非辐射能量损失，为实验报道的碱金属提



升钙钛矿光伏性能补充了新的理论解释。

### 参考文献：

- [1] Qiao, L.; Fang, W.-H.; Long, R.; Prezhdo, O. V. Atomic Model for Alkali Metal Passivation of Point Defects at Perovskite Grain Boundaries. *Acs Energy Lett.* **2020**, *5* (12), 3813-3820.
- [2] Qiao, L.; Fang, W.-H.; Long, R.; Prezhdo, O. V. Extending Carrier Lifetimes in Lead Halide Perovskites with Alkali Metals by Passivating and Eliminating Halide Interstitial Defects. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59* (12), 4684-4690.
- [3] Qiao, L.; Fang, W. H.; Long, R. The Interplay Between Lead Vacancy and Water Rationalizes the Puzzle of Charge Carrier Lifetimes in  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ : Time-Domain Ab Initio Analysis. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59* (32), 13347-13353.

**个人简介：**乔璐，北京师范大学博士生。2017年于河北师范大学获得学士学位，2017年至今在北京师范大学化学学院硕博连读。硕博连读期间荣获“宝钢奖学金”，“国家奖学金”等荣誉，共发表核心期刊文章12篇，以第一作者身份在 *J. Am. Chem. Soc.*; *Angew. Chem. Int. Ed.*; *Acs Energy Lett.* 等期刊发表文章8篇。目前工作主要围绕钙钛矿光生载流子动力学的理论研究。



**报告题目：双层  $\text{MBi}_2\text{Te}_4$  ( $\text{M} = \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$ ) 中层堆叠方式决定的拓扑相**

**报告人：彭瑞 马衍东\***

山东大学 [pengr@mail.sdu.edu.cn](mailto:pengr@mail.sdu.edu.cn)

**摘要：**

受扭曲双层石墨烯突破性进展的启发，堆叠方式引发的物理现象成为凝聚态领域的研究热点。这些物理现象蕴含着丰富而又新颖的物理学。然而，目前的研究仅限于电子性质、超导性和磁性。本文利用第一性原理计算，揭示了双层  $\text{MBi}_2\text{Te}_4$  ( $\text{M}=\text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$ ) 的堆积方式与拓扑性质之间的关系。我们证明，堆叠方式决定了拓扑性质。改变堆积方式，可以实现平庸态和非平庸态之间的拓扑相变。我们揭示了这种堆叠方式决定的拓扑性质是由层间 Te-pz 轨道间的耦合引起的，堆叠方式不同，轨道间的耦合也不同。我们的工作不仅扩展了堆叠方式引发的物理现象的范围，而且为研究这种新型堆叠方式决定的拓扑性质提供了一个很有前景的实验平台。

**个人简介：**

彭瑞，山东大学物理学院博士二年级研究生，师从马衍东教授，研究主要集中在二维材料中的能谷物理及结构性质。近年来，作为第一作者在 Nano letters、Materials Horizons、Physical Review B 等期刊发表学术论文 7 篇，SCI 引用 200 余次，其中两篇入选 ESI 高被引论文。曾获山东大学校长奖学金、国家奖学金、山东大学“五·四”青年科学奖等荣誉。



## 报告题目：双层晶格中的铁弹-铁电多铁

报告人：张婷 马衍东\*

山东大学 [tingzhang@mail.sdu.edu.cn](mailto:tingzhang@mail.sdu.edu.cn)

### 摘要：

结合铁弹序和铁电序的二维多铁，促使前所未有的应用探索，如高密度多态存储。然而，目前对铁弹-铁电-多铁的研究大多基于具有独特对称性的单层晶格，这限制了铁弹性铁电的研究十分有限。在我们的工作中，超越了现有的范式，报告了一个新的设计原则<sup>[1]</sup>：以范德华相互作用作为微扰在双层晶格中实现铁弹-铁电-多铁性。利用第一性原理，我们证明了双层  $ZrI_2$  不仅由于其晶体对称性而具有  $120^\circ$  铁弹性，而且由于层间电荷重新分布同时面外和面内铁电极化，从而在双层晶格中实现铁弹-铁电-多铁性。平面外铁电极化反转与层间滑移有关，平面内铁电极化反转与  $120^\circ$  铁弹转变有关。基于这一事实，我们提出了六逻辑态多铁性。本文阐述了一种实现和发展二维铁弹性-铁电的有效方案。

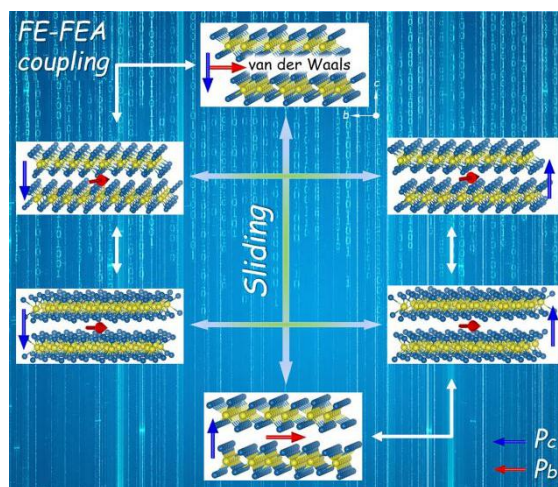


图 1. 基于双层  $ZrI_2$  铁弹性-铁电耦合的六逻辑态多铁性示意图

### 个人简介：

张婷，山东大学物理学院博士一年级研究生，师从马衍东教授，目前主要研究方向是二维多铁材料和能谷材料的计算模拟。近年来作为第一作者在 *Materials Horizons*, *Physical Review B*, *ACS Applied Materials Interface* 等期刊发表学术论文 5 篇，曾获 2019 年度研究生国家奖学金、山东大学“五·四”青年科学奖等荣誉。



## 报告题目：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

报告人：毛宁 牛成旺\*

山东大学 [maon@mail.sdu.edu.cn](mailto:maon@mail.sdu.edu.cn)

### 摘要：

拓扑序和磁序的结合会促进拓扑自旋电子学的基础理论和实际应用的相关研究。在我们的工作中，我们提出铁磁方向的改变会打破保护相应拓扑晶体绝缘相的对称性，从而实现二阶拓扑相。利用紧束缚方法和第一性原理计算，我们证明了单层 NpSb 是一个有着 220 meV 的铁磁拓扑晶体绝缘体。同时，我们发现当材料的磁方向沿着 z 轴的时候， $M_z$  镜面的存在使得材料的各个边缘都展现出一对螺旋的边缘态，并且镜面陈数也展现出 1 的量子化行为。当我们旋转磁方向到沿 x 轴的时候， $M_z$  镜面被打破，使得材料经历一个拓扑相变，从而成为二阶拓扑绝缘体。原来的一维边缘的无隙边缘态中产生了一个带隙，在边缘态的带隙之中出现了零维的拓扑角态。

### 个人简介：

毛宁，山东大学物理学院博士一年级研究生，师从牛成旺教授，目前研究方向主要集中于拓扑晶体绝缘体相，高阶拓扑相和脆弱拓扑相，近年来作为第一作者在 *Physical Review B* 发表学术论文 3 篇。



## 报告题目：晶体对称性破缺导致的谷极化

报告人：王媛媛 牛成旺\*

山东大学 [yy\\_wang93@163.com](mailto:yy_wang93@163.com)

### 摘要：

在具有特殊对称性的晶体材料中，布洛赫电子的能谷可以作为一个新的信息承载自由度。如果材料中的一系列简并或者接近简并的能谷能够被动态地极化和探测，原则上这些能谷就可以形成分立的自由度用以实现信息编码和操作。在对称性破缺的二维六角蜂窝晶格中，通过圆偏振光激发实现谷霍尔效应或者打破其时间反演对称性实现反常谷霍尔效应可以对材料中能量简并的谷进行探测。不同于上述的谷极化探测方式，基于我们提出的谷对比的子晶格极化机制，我们研究了晶体对称性破缺而不是时间反演对称性破缺在引入谷极化方面的作用，使用这种新机制，无需引入磁场、电场或光泵浦过程就可以很容易地产生明显的谷极化。紧束缚模型分析和第一性原理计算证实  $\text{LaOBiS}_2$  是将这种新的谷极化机制转化为实际应用的理想载体，由于其具有很高的实验可行性。因此，这些有趣的发现将为探索谷对比物理提供了新的思路。

### 个人简介：

王媛媛，山东大学物理学院博士二年级研究生，师从牛成旺教授，研究兴趣主要集中于二维极性材料中的电子性质及能谷性质的第一性原理研究，近年来，作为第一作者在 *Materials Horizons* 等期刊发表学术论文 7 篇。





## 报告题目：“三铁性”CrI<sub>2</sub>单层—结合 Jahn-Teller 畸变和 界面效应

报告人：杨柳 吴梦昊\*

华中科技大学 [liuyang\\_phy@hust.edu.cn](mailto:liuyang_phy@hust.edu.cn)

### 摘要：

自从多铁材料被发现以来，多种铁性共存以及铁性之间存在互相耦合和调控就成为人们孜孜以求的目标。最近，CrI<sub>3</sub>的同素异形体，二维 CrI<sub>2</sub> 在实验上被成功制备出来。我们通过第一性原理计算，证明了二维 CrI<sub>2</sub> 中独特的铁弹、铁电、铁磁的“三铁性”共存，以及铁性之间的相互耦合。其中，具有低翻转势垒的铁弹性来源于 Jahn-Teller 效应。铁电性可以通过进一步结合 Jahn-Teller 效应和衬底的界面效应实现，不同铁电态可以通过低势垒的铁弹翻转相互转换。同时，二维 CrI<sub>2</sub> 具有的条纹反铁磁的方向同样可以通过铁弹翻转切换，这样铁弹、铁磁、铁电就实现了互相耦合，使得高效非易失随机存储器件中的电操纵自旋电子态成为可能。以上通过结合 Jahn-Teller 效应和层间界面效应实现多铁性的机制可以推广到一系列有着相似晶格的二维材料，如 CuCl<sub>2</sub>、WTe<sub>2</sub> 以及其他 Janus 单层材料。

### 参考文献：

- [1] Yang L, Wu M, Yao K. Transition-metal-doped group-IV monochalcogenides: a combination of two-dimensional triferroics and diluted magnetic semiconductors. *Nanotechnology*, 2018, 29(21):215703.

### 个人简介：

杨柳，华中科技大学 2020 级在读博士，中共党员，男，1993 年 10 月出生。2015 年毕业于三峡大学理学院获得学士学位，2018 年毕业于华中科技大学物理学院获得硕士学位（导师：姚凯伦），2018.7-2019.12 年中共湖北省省委组织部选调生，2020.9-至今 华中科技大学物理学院凝聚态物理研究所博士（导师：吴梦昊）。现主要基于第一性原理计算，分子动力学模拟等手段研究低维材料的电学、磁学等性质，及其在能源、信息存储方面的应用，通过化学修饰，掺杂等办法加以调节，设计磁电等各种功能器件。



## 报告题目: Excitonic Instability and Electronic Property of Two-dimensional materials

报告人: 董珊 李元昌\*

北京理工大学 18336097015@163.com

### 摘要:

First-principles density functional theory plus Bethe-Salpeter equation calculations are employed to investigate the electronic and excitonic properties of [two-dimension materials](#). It is found that the band gap and exciton binding energy of monolayer titanium trichalcogenide alloys  $\text{TiS}_{3-x}\text{Se}_x$  ( $x = 1$  and  $2$ ) display asymmetric dependence on the substitution of Se for S. While the band gap can be significantly decreased as compared to that of pristine  $\text{TiS}_3$ , the exciton binding energy varies slightly, regardless of the position and concentration of the Se substitution. A negative exciton formation energy is found when the central S atoms are replaced by Se atoms, suggesting a many-body ground state with spontaneous exciton condensation.

Motivated by the recent synthesis of two-dimensional monolayer  $\text{AlSb}$ , we theoretically investigate its ground state and electronic properties. An excitonic instability is revealed as a result of larger exciton binding energy than the corresponding one-electron energy gap by  $-0.1$  eV. At room temperature, the two-dimensional monolayer  $\text{AlSb}$  is a direct gap semiconductor with phonon-limited electron and hole mobilities both around  $1700 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ . These results show that monolayer  $\text{AlSb}$  may provide a promising platform for realization of the excitonic insulator and for applications in the next-generation electronic devices. Our work offers insight for engineering an excitonic insulator.

### 参考文献:

- [1] Dong S, Li Y. Transition from band insulator to excitonic insulator via alloying Se into monolayer  $\text{TiS}_3$ : A computational study[J]. *Physical Review B*, 2020, 102(15): 155119.
- [2] Dong S, Li Y. Excitonic Instability and Electronic Property of Two-dimensional  $\text{AlSb}$  Limit[J]. *arXiv preprint arXiv:2102.07375*, 2021
- [3] Jiang Z, Liu Z, Li Y, et al. Scaling universality between band gap and exciton binding energy of two-dimensional semiconductors[J]. *Physical review letters*, 2017, 118(26): 266401.

### 个人简介:

董珊, 北京理工大学博士在读。2012年考入河南师范大学, 第一届本硕连读生; 2016年加入河南师范大学杨宗献教授课题组, 师从杨宗献教授; 2018年加入北京理工大学, 姚裕贵教授课题组, 指导老师为李元昌教授。

研究方向: 1. 二维材料激子绝缘体的第一性原理计算。2. 固体氧化物阳极结构的催化, 模拟及设计。

学术成就: 现已在 *Phys. Rev. B*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 和 *J Phys. Chem. C* 等国际著名期刊发表文章 7 篇, 其中第一作者发表论文 6 篇。2021 年 7 月获“2021 材料多尺度计算模拟会议”优秀墙报; 2021 年 6 月获北京理工大学优秀博士育苗基金; 2019 年 5 月荣获河南省优秀硕士学位论文; 2017 年 8 月荣获第十三届“挑战杯”大学生课外学术科技作品竞赛, 省级二等奖; 2016 年 6 月荣获东芝杯理科生教学技能大赛校级荣誉; 2016 年 11 月荣获校级科研创新项目; 2015 年 8 月荣获第十二届“挑战杯”大学生课外学术科技作品竞赛, 省级二等奖; 2013 年荣获大学生创新创业训练计划, 国家级项目。



**报告题目： Electric field control of molecular magnetic state by  
two-dimensional ferroelectric heterostructure engineering**

**报告人：党文 齐景山\***

江苏师范大学 [136454011@qq.com](mailto:136454011@qq.com)

**摘要：**

Two-dimensional multiferroics have attracted tremendous attention due to their intriguing physics and promising applications. However, it has been a major challenge to discover and design two-dimensional multiferroic materials with large electric polarization and strong magnetoelectric coupling. In this work, we propose a strategy to design a two-dimensional van der Waals heterostructure with strong magnetoelectric coupling by stacking a transition metal phthalocyanine (TMPc) molecule with ferroelectric monolayer  $\text{In}_2\text{Se}_3$ . By first-principles electronic structure calculations, we predict that the magnetic states of the TMPc molecule can be controlled by electrically switching the polarization direction of  $\text{In}_2\text{Se}_3$  using an external electric field. This strong magnetoelectric coupling effect originates from the interfacial charge transfer and orbital splitting, resulting in the different magnetic states of TMPc/ $\text{In}_2\text{Se}_3$  heterostructures in two opposite ferroelectric phases. Based on the TMPc/ $\text{In}_2\text{Se}_3$  heterostructure, a high-density magnetic memory device is proposed for pure electric writing and magnetic reading. Our predictions may open avenues for finding and designing multiferroic heterostructures by using two-dimensional ferroelectric materials and zero-dimensional magnetic molecules with a strong proximity effect.

**个人简介：**

党文，江苏师范大学物理与电子工程学院；

研究方向：关联电子物理与材料：包括多铁性氧化物、磁电耦合效应；  
关联电子异质结、场效应器件；新能源材料；超导材料。



## 报告题目: **Ideal topological semimetal in bulk boron allotropes**

报告人: 韩圣茹 刘志锋\*

内蒙古大学 [srhanimu@163.com](mailto:srhanimu@163.com)

### 摘要:

Ideal topological semimetals, which are composed of non-toxic lightweight elements and host clean Dirac/Weyl fermions near the Fermi energy without contamination from other quasiparticles, are highly desirable for experimental detection and practical application. In this report, using first-principles calculations, we first introduce a new structure, termed 3D borophene, which can be obtained by stacking synthesized 2D triangular borophene along the perpendicular direction. It has two Weyl nodal lines running across the Brillouin zone in the  $k_y = 0$  plane and the nodal lines are composed of type-II Weyl points. Based on it, we next propose a new stable boron allotrope, ort-B<sub>32</sub>, and demonstrate it harbors the needed clean Weyl fermions in a sizable energy window under modest tensile strain. Owing to the protection of mirror symmetry, the Weyl points form two pairs of parallel arc-like nodal lines, running across the whole Brillouin zone in the  $k_z = 0$  plane. Remarkably, our examination of slope index reveals that the type-I, type-II and type-III Weyl states can be found in different moment directions with the value of Fermi velocities ranging from 0 to  $1.15 \times 10^6$  m/s. Our results not only establish two striking new boron allotropes, but also highlight the method for realizing ideal Weyl semimetal.

### 参考文献:

- [1] L. Y. Cui, T. L. Song, J. T. Cai, X. Cui, Z. F. Liu\*, J. J. Zhao\*, Three-dimensional borophene: A light-element topological nodal-line semimetal with direction-dependent type-II Weyl fermions, *Physical Review B*, 102 (2020) 155133.
- [2] S. R. Han, C. Y. Li, L. Y. Cui, X. Cui, T. L. Song, Z. F. Liu\*, Strain Induced Ideal Topological Semimetal in Ort-B<sub>32</sub> Holding Parallel Arc-Like Nodal Lines and Anisotropic Multiple Weyl Fermions, (submitted to *Physica Status Solidi-Rapid Research Letters*).

### 个人简介:

韩圣茹, 内蒙古大学研究生;

学习经历:

2015~2019 内蒙古大学, 物理科学与技术学院, 理科学士学位;

2019~至今 内蒙古大学, 物理科学与技术学院, 在读研究生, 导师为刘志锋副教授。



## 报告题目: $\text{Cu}_2\text{N}$ 和 $\text{CuN}_2$ 单层作为 $\text{CO}_2\text{RR}$ 的高效电催化剂

报告人: 贾晶晶 赵景祥\*

哈尔滨师范大学 [jjj15148207442@163.com](mailto:jjj15148207442@163.com)

### 摘要:

在全局结构搜索和密度泛函理论计算的基础上<sup>[1-3]</sup>, 确定了新型二维 (2D)  $\text{Cu}_2\text{N}$  和  $\text{CuN}_2$ : 显示单层具有高热稳定性、动态稳定性和化学稳定性以及金属性质, 从而提供了很好的其在电化学反应中实际应用的可行性。我们的计算表明,  $\text{Cu}_2\text{N}$  单层是有趣的,  $\text{Cu}_2\text{N}$  单层的基面表现出优异的催化活性, 并以 0.33 V 的小极限电位和 0.41 eV 的超低能垒催化  $\text{CO}_2$  电还原为  $\text{C}_2\text{H}_6$ <sup>[4,5]</sup>。另一方面,  $\text{CuN}_2$  单层需要 0.27eV 才能产生  $\text{HCOOH}$ <sup>[6,7]</sup>。因此, 我们预测,  $\text{Cu}_x\text{N}_y$  单层不仅开辟了一条途径来探索具有高效将  $\text{CO}_2$  转化为  $\text{C}_2$  产品的有前景的催化剂, 而且还为 2D TMN 材料家族提供了一些新成员。

### 参考文献:

- [1] Y. Wang, J. Lv, L. Zhu and Y. Ma, *Comput. Phys. Commun.* 2012, 183, 2063–2070.
- [2] G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.*, 1993, 47, 558–561.
- [3] G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.*, 1996, 54, 11169–11186.
- [4] C. Wang, W. Lu, Q. Lai, P. Xu, H. Zhang, X. Li, *Adv. Mater.* 2019, 31, 1904690.
- [5] Z.-Q. Liang, T.-T. Zhuang, A. Seifitokaldani, J. Li, C.-W. Huang, C.-S. Tan, Y. Li, P. De Luna, C.T. Dinh, Y. Hu, Q. Xiao, P.-L. Hsieh, Y. Wang, F. Li, R. Quintero-Bermudez, Y. Zhou, P. Chen, Y. Pang, S.-C. Lo, L.-J. Chen, H. Tan, Z. Xu, S. Zhao, D. Sinton, E.H. Sargent, *Nat. Commun.* 2018, 9, 3828.
- [6] B. Liu, B. He, H.Q. Peng, Y.F. Zhao, J.Y. Cheng, J. Xia, J.H. Shen, T.W. Ng, X.M. Meng, C.S. Lee, W.J. Zhang, *Adv. Sci.* 2018, 5, 1800406.
- [7] Y. Chen, Z. Fan, Z. Zhang, W. Niu, C. Li, N. Yang, B. Chen, H. Zhang, *Chem. Rev.* 2018, 118, 6409–6455.

### 个人简介:

贾晶晶, 哈尔滨师范大学 2019 级物理化学在读硕士; 目前主要研究方向为二维材料电催化预测及性能的理论研究, 现已在 *Journal of MatErials Chemistry A*, *ACS Applied Materials & Interfaces* 和 *Journal of Colloid and Interface. Science*. 发表 SCI 论文三篇, 其中一区两篇, 二区一篇。获得 2020 年国家奖学金和优秀研究生以及 2021 年学业奖学金。





报告题目：二维  $\text{Ti}_2\text{C}$  吸附肺癌气体标志物乙苯的  
第一性原理研究

报告人：赵丹 钱钊\*

山东大学 [15098738588@163.com](mailto:15098738588@163.com)

摘要：

利用密度泛函理论(DFT)计算,我们分别研究了本征、掺杂和含空位缺陷的二维  $\text{Ti}_2\text{C}$  纳米片对肺癌气体标志物乙苯分子的吸附性质,以此来探索其潜在的吸附或传感性能。通过对优化后的原子尺度结构、吸附能和电子结构的比较,发现空位缺陷提高了  $\text{Ti}_2\text{C}$  纳米片对乙苯的吸附能。但掺杂的  $\text{Ti}_2\text{C}$  纳米片对乙苯分子的吸附作用随掺杂原子的不同而变化。其中, Si 掺杂和 Mn 掺杂的  $\text{Ti}_2\text{C}$  纳米片均表现出良好的吸附潜力。此外,我们研究了乙苯和  $\text{Ti}_2\text{C}$  纳米片之间的电荷转移机制,并以此探索其电子结构变化的深层根源。

个人简介：

赵丹,女,22岁,2016.09-2020.06在山东大学材料科学与工程学院就读本科,2020.09至今在山东大学材料科学与工程学院攻读硕士研究生。研究生期间主要进行第一性原理计算方面的研究,并已独立完成课题“二维  $\text{Ti}_2\text{C}$  吸附肺癌气体标志物乙苯的第一性原理研究”。自入学至今,已获得“研究生优秀生源奖学金”、“研究生学业奖学金”、“济南市优秀志愿者”等奖项。熟练操作 VASP、Masterial Studio、VESTA、Origin、CAD、NX 等软件。



报告题目：2H-MoTe<sub>2</sub> 和 1T'-WTe<sub>2</sub> 面内异质结的

第一性原理研究

报告人：张潘 田之雪\*

河北师范大学 3287458001@qq.com

摘要：

我们把 2H-MoTe<sub>2</sub> 和 1T'-WTe<sub>2</sub> 沿着 armchair 和 zigzag 边缘连接，搭建了 9 种面内异质结，通过筛选我们确定出 5 种稳定的结构。然后，我们对它们进行了第一性原理计算，其中值得注意的是，由于边界效应，沿 a 方向搭建的两种结构在费米能级附近出现了能带反转情况，可能具有拓扑半金属性质。沿 b 方向拼接的异质结，呈现出小能隙半导体的电子性质，之后我们计算了它们的接触势垒，发现和前人研究结果相近。同时，在计算中我们还发现所搭建的平面内异质结的电子性质与搭建的模型长度有关。

个人简介：

张潘，河北师范大学硕士研究生（二年级），导师：田之雪副教授。目前的研究方向是采用第一性原理计算方法研究二维过渡金属硫族化合物组成的垂直、平面内异质结的电子结构性质。



## 报告题目：二维 $g$ -CN 负载的单原子催化剂用于电催化氮还原的研究

报告人：王淑华 魏巍\*

山东大学 wangsh722@gmail.com

### 摘要：

氨是一种重要的化工原料。目前，工业上将氮气转化为氨气主要依赖于 Haber-Bosch 工艺，然而此合成过程反应条件严苛、耗能高以及碳排放问题显著。以可再生能源为驱动力的电催化氮还原技术成功实现了温和条件下的氨气生产，然而由于氮氮三键的高稳定性，使得电催化氮还原存在着巨大的热力学阻碍。这项工作中，通过第一性原理计算，我们寻找到一种理想的单原子催化剂载体二维石墨烯状多孔碳氮聚合物( $g$ -CN)，并且研究了一系列过渡金属原子作为活性中心用于电催化氮还原。通过筛选证明， $W/g$ -CN 是一种有潜力的氮还原催化剂，具有高的催化活性和选择性，限制电位仅为 0.34 V，同时兼具良好的热学和动力学稳定性，有望在实验上成功合成。此外，还讨论了活性中心和配体之间的协同效应在合理设计有效氮还原催化剂中的重要作用。

### 个人简介：

王淑华，山东大学物理学院博士一年级研究生，师从魏巍教授，目前研究方向主要集中于低维材料在电化学应用的理论模拟。近年来作为第一作者在 *Journal of Materials Chemistry A* 发表学术论文 1 篇。



## 报告题目：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

报告人：焦东旭 赵景祥\*

哈尔滨师范大学 527819893@qq.com

### 摘要：

通过控制单原子催化剂 (SAC) 的配位环境来调整其电子结构在最近已被证明是进一步提高其在某些电化学反应中催化性能的一种相当有前景的策略。在此，通过密度泛函理论 (DFT) 计算，探讨了 Fe-N-C 催化剂的配位结构对其催化氮还原反应 (NRR) 活性的影响。我们的结果表明，中心 Fe 原子上的 NRR 活性可以通过其与硼 (B) 掺杂剂的配位而大大提高。特别是，计算出 Fe-B<sub>2</sub>N<sub>2</sub> 对 NRR 的限制电位为 -0.65 V，这是所有 B 掺杂的 Fe-N-C 催化剂中最低的，表明其具有高 NRR 催化活性。有趣的是，B 配位的引入可以有效地调节单个 Fe 原子与 N<sub>2</sub>H\* 物种的相互作用，从而提高其 NRR 催化性能。此外，Fe-B<sub>2</sub>N<sub>2</sub> 通过在热力学和动力学上有效抑制竞争性析氢反应 (HER)，表现出高 NRR 选择性。因此，具有 N 和 B 双配位的单一 Fe 催化剂可以作为一种很有前途的 NRR 电催化剂，这不仅突出了局部配位对 NRR 催化活性和选择性的重要作用，而且为进一步开发更先进的用于合成氨的单原子催化剂提供了新的契机。

### 参考文献：

- [1] A. Liu, Y. Yang, X. Ren, Q. Zhao, M. Gao, W. Guan, F. Meng, L. Gao, Q. Yang, X. Liang and T. Ma, *ChemSusChem*, 2020, 13, 3766-3788.
- [2] J. Wang, S. Chen, Z. Li, G. Li and X. Liu, *ChemElectroChem*, 2020, 7, 1067-1079.
- [3] V. Kyriakou, I. Garagounis, E. Vasileiou, A. Vourros and M. Stoukides, *Catal. Today*, 2017, 286, 2-13.
- [4] X.-F. Li, Q.-K. Li, J. Cheng, L. Liu, Q. Yan, Y. Wu, X.-H. Zhang, Z.-Y. Wang, Q. Qiu and Y. Luo, *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, 138, 8706-8709.
- [5] X. Guo, J. Gu, X. Hu, S. Zhang, Z. Chen and S. Huang, *Catal. Today*, 2020, 350, 91-99.

### 个人简介：

焦东旭，哈尔滨师范大学 2019 级物理化学在读硕士；目前主要研究方向为二维材料电催化性能的理论研究，现已在 *Journal of Materials Chemistry A*, *Physical Chemistry Chemical Physics* 发表 SCI 论文两篇，其中一区一篇，二区一篇。获得优秀研究生和 2021 年学业奖学金。



## 报告题目：C<sub>3</sub>N<sub>5</sub> 多层：一种可全解水的无金属高效催化剂

报告人：齐思云 赵明文\*

山东大学 464010934@qq.com

### 摘要：

通过光催化分解水制备氢气和氧气是一种很有前景的生产可再生能源的方法，受到了越来越多的关注。一个高效的光催化剂应该具有较高的太阳能转换效率和较强的光催化氧化还原能力，以便驱动析氢反应(HER)和析氧反应(OER)的发生。然而，可以满足光催化剂的这两种要求的合适的材料并不多。在这里，我们采用了第一性原理计算证明了最近合成的二维 C<sub>3</sub>N<sub>5</sub> 多层材料有望达到这一目的，首先，多层材料中内建电场的存在改变了能带的带边位置，从而可以自发驱动 HER 和 OER 反应。褶皱的存在有利于材料中 VBM 和 CBM 中载流子的分离；其次，受材料厚度的影响，带隙也随之变化(2.95-2.16 eV)，增加了材料的光吸收效率。同时，材料具备高载流子迁移率，可以促进载流子的分离和转移，还有较高的 STH 效率，随着层数的增加，效率越来越高，可以扩大光吸收的能量范围，这些都有利于材料具备一个较高的太阳能转换效率。我们的计算结果不仅提供了一种低成本，元素丰富不含金属元素且环境友好的光催化材料，且也为设计高效的全解水不含牺牲剂的光催化材料提供了一种设计策略。

### 个人简介：

齐思云，山东大学物理学院 2019 级博士研究生，师从赵明文教授。  
主要研究方向为新型光催化，电催化等新能源材料的理论计算。





## 报告题目：铂在二氧化铈晶界表面上偏聚性质的理论研究

报告人：李哲 田之雪\*

河北师范大学 1096405726@qq.com

### 摘要：

我们分别在  $\text{CeO}_2\Sigma3(111)$ 晶界的  $[1\bar{1}0]$ 和  $[11\bar{2}]$ 方向上建立的两种表面模型。通过计算 Pt 在  $\text{CeO}_2$  体内、表面、体内晶界和晶界表面上的形成能来确定它的偏聚趋势。我们的计算发现，即使在没有氧空位的情况下，Pt 更倾向于偏聚到晶界和表面的交汇处(晶界@表面)，且它沿着  $[1\bar{1}0]$ 和  $[11\bar{2}]$ 方向的偏聚趋势相当，偏聚能只差 0.017eV；其次是 Pt 向  $(11\bar{2})$ 表面偏聚，这比它在体内晶界上的偏聚能低 1.238 eV，这与我们前期的工作结果相符合<sup>[1]</sup>。当继续向纯净晶界@表面上增加 Pt 原子时，两个 Pt 原子之间具有较弱的排斥相互作用，因此 Pt 原子不利于在表面晶界处聚集。接下来，我们还将研究在有氧空位的情况下，Pt 在晶界@表面上的偏聚性质。由于晶界@表面对 Pt 原子的捕获作用比(110)和(112)表面更强，因此，我们认为，如果在  $\text{CeO}_2$  的表面上构建一系列的高密度晶界，可以有效地降低 Pt 在表面上的大量聚集，增强 Pt/ $\text{CeO}_2$  催化剂的催化活性。

### 个人简介：

李哲，河北师范大学硕士研究生（一年级），导师：田之雪副教授。  
目前的研究方向是采用第一性原理计算方法研究金属氧化物晶界表面作为载体在贵金属催化解离 NO 过程中发挥的作用和影响机制。



## 报告题目: H4,4,4-graphyne 用于双功能单原子催化剂的理论研究

报告人: 张好娜 戴瑛\*

山东大学 [zhanghn@mail.sdu.edu.cn](mailto:zhanghn@mail.sdu.edu.cn)

### 摘要:

单原子催化剂因其超高的原子利用率、高的催化活性和低成本等优点,在电化学领域引起了广泛的关注。然而,在近期的研究中,用于水分解的双功能 SACs 还不多见,且面临着高过电位的挑战。在本工作中,通过第一性原理计算,我们探究了一系列过渡金属(TM)原子负载到二维(2D) H4,4,4-石墨炔单层上形成的双功能 SACs 可用于 HER/OER 和 OER/ORR。结果表明: Co@H4,4,4-GY 和 Pt@H4,4,4-GY 可作为高效电解水催化剂,对应 HER/OER 过电位分别为 0.04/0.45 和 0.17/0.69 V。此外, Ni@H4,4,4-GY 作为双功能 SACs 对 OER/ORR 也表现出良好的催化活性,其过电位为 0.34/0.29 V,甚至优于商业上使用的 IrO<sub>2</sub> 和 RuO<sub>2</sub>。结果表明, TM 与衬底的配位以及局部电子性质对 HER/OER/ORR 的催化性能具有显著影响。金属 d 轨道中心可以作为有效描述符来提升催化剂的催化性能。

### 个人简介:

张好娜,山东大学物理学院硕士二年级研究生,导师戴瑛教授,合作导师魏巍教授。主要研究方向是:基于第一性原理计算,研究二维材料的结构及电子性质,并进一步探究其在电催化和光催化领域的潜在应用;旨在设计出新颖的功能材料,揭示其化学或物理来源。此外,对研究二维多铁材料和拓扑材料也有着广泛的兴趣。在读期间以第一作者在 JMCA, Appl. Surf. Sci. 期刊发表学术论文 2 篇,以第二作者与实验组合作一篇。曾荣获山东大学 2019 和 2020 年度学业奖学金。



报告题目：过渡金属吸附调节 Cr 基 MXenes 氧电子轨道占据以  
提高 HER 活性

报告人：陈璐 杨宗献\*

河南师范大学 2479971232@qq.com

摘要：

调控二维 MXenes 的表面电子性质对于激活其析氢反应活性具有重要意义。本文基于密度泛函理论计算利用一系列过渡金属原子吸附对含氧官能团的 Cr 基 MXenes 表面电子性质进行调控，使其具有优异的催化析氢反应性能。结果表明表面氧原子的电荷对氢的吸附强度起着决定性的作用，而表面氧原子的电荷受宿主金属原子和吸附的过渡金属原子的影响。由于在 Cr<sub>2</sub>TiC<sub>2</sub>O<sub>2</sub> MXenes 上沉积 Cr 原子的氢吸附能为 0.03eV，非常接近于零，所以它有望成为活性最佳的 HER 催化剂。系统的电子结构分析证实，电荷从被吸附的过渡金属转移到邻近的表面氧原子，这将调节氧的轨道占有率和它们对氢原子的吸附，从而调节 HER 的活性。这些发现和概念可能有助于设计先进的 MXene 基 HER 催化剂。

个人简介：

陈璐，河南师范大学在读硕士，研究生期间都在做一些基于密度泛函理论关于电催化方面的研究，在老师和师兄师姐的帮助下，近期在 International Journal of Hydrogen Energy 杂志上发表了工作。



## 报告题目: 缺电子体系对 Na 原子吸附强弱的机理研究---以 MoS<sub>2</sub> 为例

报告人: 庞玉东 杨宗献\*

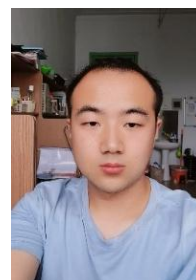
河南师范大学 [ydpang@126.com](mailto:ydpang@126.com)

### 摘要:

锂离子电池已被广泛的使用, 由于锂元素储量有限而限制了它的发展。钠元素和锂元素具有相似的物理化学性质, 钠离子电池是锂离子电池的理想替代品。由于对电极材料与 Na 离子的相互作用机理理解不清晰, 无法在理论上提供可靠的指导而阻碍了 Na 离子电池的发展。基于第一性原理计算, 我们研究了电场/掺杂/总电荷数对 Na 离子在 MoS<sub>2</sub> 衬底上吸附的影响。结果显示从 MoS<sub>2</sub> 体系中抽出一个电荷、使用价电子数小于硫元素的原子 (B、Al、Ga、In、C、Si、Ge、Sn、P、As、Sb) 替代 MoS<sub>2</sub> 中的一个 S 原子之后增强了 Na 与衬底之间的相互作用。反之, 当向 N-MoS<sub>2</sub> 体系注入一个额外的电荷, 含有额外电荷的 N-MoS<sub>2</sub> 衬底对 Na 的吸附减弱。最后, 我们分析了 Na 的扩散、开路电压和理论容量, 发现 Si、As、Al 元素替代一个 S 原子扩散势垒较小为: ~0.08 eV。Si、Ge、Ga 元素替代 S 原子能够达到较好的容量和较高的开路电压。

### 个人简介:

庞玉东, 河南师范大学在读博士, 近几年基于 DFT 研究 Na 离子电池电极材料, 在路战胜、乔云、杨宗献老师的悉心指导下, 取得了一些小成果。在 JMCA、JEC、Applied surface science 等期刊上发表过工作。



报告题目：具有高居里温度的二维  $\text{MnB}_6$  单层的  
第一性原理探究

报告人：高珍 马风仙\*

河北师范大学 1323341943@qq.com

摘要：

目前,以石墨烯为代表的二维材料由于其本身独特的优异性能和潜在的应用价值引起了广泛的关注,但是纯石墨烯本征带隙的缺乏,极大地限制了石墨烯的应用领域。于是研究者们把目光放在发现新型二维材料上。因此,如  $\text{MoS}_2$ , BP, h-BN 等二维材料陆续被发现,这些材料的性能各有特点,优势互补,可以应用在电子器件和光电电子器件中<sup>1</sup>。虽然传统二维材料的性能已经十分优异,但二维材料中本征磁性的缺失,严重限制了二维材料在自旋电子器件以及信息存储操纵等领域的应用。因此,寻找和设计具有优异物理化学性质的二维磁性材料是研究的热点之一。基于这一理念,  $\text{CrI}_3$  和  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  磁性二维材料被先后发现<sup>2,3</sup>。这些材料中本征磁性的发现,使二维材料有望应用于自旋电子器件和信息操纵与存储等重要领域。通过使用 CALYPSO 搜索和第一性原理计算,我们预测了两种能量较低的  $\text{MnB}_6$  单层,即  $\text{MnB}_6\text{-I}$  和  $\text{MnB}_6\text{-II}$ , 它们具有高稳定性和有趣的电子和磁性质。具体而言,声子谱和从头算分子动力学模拟表明这两个单层是动态和热稳定的。 $\text{MnB}_6\text{-I}$  和  $\text{MnB}_6\text{-II}$  都是金属的,分别具有铁磁 (FM) 和反铁磁 (AFM) 基态。当考虑自旋轨道耦合时,可以在  $\text{MnB}_6\text{-I}$  单层中找到 II 型狄拉克点和相当大的磁晶各向异性能量(每个 Mn 原子  $938\mu\text{eV}$ )。基于海森堡模型的蒙特卡罗模拟表明,  $\text{MnB}_6\text{-I}$  单层的居里温度高达 470 K, 高于室温。 $\text{MnB}_6$  单层优异的电子和磁性能有望使其成为自旋电子应用的候选者。

个人简介：

高珍, 目前就读于河北师范大学物理学院, 导师是马风仙副教授, 研究方向主要基于第一性原理计算研究低维纳米材料的电子结构, 力学, 磁学, 光学性质。



## 报告题目：过渡金属二聚体锚固 C<sub>2</sub>N 作为双原子催化剂在锂硫 电池中的应用

报告人：朱一凡 潘圆圆\*

中国石油大学（华东） 624236871@qq.com

### 摘要：

具有  $sp^2$  杂化碳原子以及氮掺杂的新型碳氮族材料 C<sub>2</sub>N<sup>[1]</sup> 是一种非常有前景的电池材料，并已在多领域证实其可实际应用的潜力。<sup>[2,3]</sup> 在 C<sub>2</sub>N 中锚固金属二聚体作为双原子催化剂<sup>[4]</sup> 可有效提高电池电化学性能。在这项工作中，我们通过密度泛函理论计算，探究了锚定在多孔 C<sub>2</sub>N 单层上的同核金属二聚体与异核金属二聚体作为锂硫电池正极材料的潜力，计算结果表明，与同核金属二聚体相比，异核金属二聚体在催化锂硫电池化学反应过程中效果更好，其中，FeCo@C<sub>2</sub>N 表现出了最优异的多硫化物吸附能力，能有效抑制穿梭效应，且放电还原反应过程中速控步的吉布斯自由能以及逆反应中 Li<sub>2</sub>S 分解势垒均较低，可以有效增强反应动力学。金属二聚体锚固 C<sub>2</sub>N 的优异电化学性能源于锚固的金属原子可以充当多硫化物的强吸附位点以及充放电反应的活性催化位点，增强反应动力学。总的来说，金属二聚体锚固 C<sub>2</sub>N 作为锂硫电池正极材料催化剂具有很大潜力，且本文为探索其他金属二聚体材料在锂硫电池中的应用提供了思路。

### 参考文献：

- [1] Mahmood, J.; Lee, E. K.; Jung, M.; Shin, D.; Jeon, I. Y.; Jung, S. M.; Choi, H. J.; Seo, J. M.; Bae, S. Y.; Sohn, S. D.; Park, N.; Oh, J. H.; Shin, H. J.; Baek, J. B. *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 6486.
- [2] Liang, Z.; Yang, D.; Tang, P.; Zhang, C.; Jacas Biendicho, J.; Zhang, Y.; Llorca, J.; Wang, X.; Li, J.; Heggen, M.; David, J.; Dunin - Borkowski, R. E.; Zhou, Y.; Morante, J. R.; Cabot, A.; Arbiol, J. *Adv. Energy Mater.* **2020**, *11*, 2003507.
- [3] Zhihong, T.; Nieves, L. S.; Chuntai, L.; Tianxi, L.; Markus, A. *Adv. Sci.* **2020**, *7*, 2001767.
- [4] Li, F.; Liu, X.; Chen, Z. *Small Methods* **2019**, *3*, (9).

### 个人简介：

朱一凡，中国石油大学（华东）化学工程学院新型碳材料课题组研究生，导师潘圆圆。





## 报告题目: DFT 计算 Z-型异质结 g-CN/MXene 光催化降解 VOCs 的机理研究

报告人: 周君慧 敖志敏\*

广东工业大学 137390450@qq.com

### 摘要:

作为雾霾的主要前驱体之一,挥发性有机污染物(VOCs)不仅对生态环境会造成破坏,而且对人体健康也会产生较大威胁,因此,使用合适的方法去除 VOCs 成为人们亟待解决的问题。本研究以 DFT 为基础,通过将 2D 材料 g-CN 和 MXene 相结合,构建了新型的 Z 型异质结 g-CN/MXene,并从 DFT 计算的角度总结提出了评价光催化剂降解 VOCs 性能的方法。对于评价体系的确定,首先是通过计算本征材料和复合材料的能带结构、氧化还原电位、光吸收谱以及复合催化剂的轨道来判定自由基的产生能力、太阳光的利用率以及催化剂内部的电子转移情况;进而计算 H<sub>2</sub>O、O<sub>2</sub> 以及 VOCs 在异质结表面的吸附性能;最终在原子水平上探讨催化剂光催化降解 VOCs 的内在机理。电子从 g-CN 的导带转移至 Zr<sub>2</sub>CO<sub>2</sub> 的价带的现象说明该催化剂为典型的 Z 型异质结,可以有效抑制电子空穴对的分离,并提高光生电子的利用率。此外,相比于本征 g-CN 和 Zr<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>,异质结 g-CN/Zr<sub>2</sub>CO<sub>2</sub> 可以有效提高可见光利用率并且促进·O<sub>2</sub><sup>-</sup>和·OH 自由基的生成,进而攻击 VOCs 的活性位点,最终将其矿化成 CO<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O。本研究以 g-CN/MXene 为例,从 DFT 计算的角度提出了一种评价光催化剂性能的方法,并探讨了其在光催化降解 VOCs 方面的研究,该工作不仅可以为 VOCs 降解催化剂的选择提供理论指导,并有望为 MXene 材料早日应用于工业领域作出贡献。

### 个人简介:

周君慧,广东工业大学博士生,主要研究方向为理论化学计算研究气态污染物的微观催化降解过程。目前,在 ACS Catal., ACS Appl. Mater. Inter., Chin. J. Catal. 等期刊上发表 SCI 学术论文 7 篇。



## 报告题目：Janus 三族硫属化物单层的非线性光学效应

报告人：李仕琪 高峻峰\*

大连理工大学 [SHIQILI@mail.dlut.edu.cn](mailto:SHIQILI@mail.dlut.edu.cn)

### 摘要：

二维材料中的非线性光学响应比如二次谐波产生在光子学，激光，频率转换，调制器等方面扮演着重要角色。二阶非线性极化率取决于材料的对称性。Janus 结构打破了镜面对称性，带来面外非线性光学响应。基于第一性原理计算结合独立粒子近似，我们系统探究了三族硫属化物及其九种 Janus 结构的非线性光学响应。他们都展现出超凡的二阶非线性光学响应。基于 HSE06 能带计算结果，我们分析了原始三族硫属化物二阶非线性光学系数谱中的主要峰值。这些峰值源于联合态密度中位于高对称点或沿着高对称线的范霍夫奇点。与原始结构相比，Janus 结构的二阶非线性极化率多出 5 个面外分量。并且，Janus 结构中的面内非线性分量元素集合了对应原始结构非线性光学响应的优点，展现出宽带非线性响应。我们的工作为实验进一步探究三族单硫化物及其 Janus 结构提供了理论指导，并为他们在非线性光学器件中的应用铺平了道路。

### 个人简介：

李仕琪，2016 年 7 月于山西师范大学获得理学学士学位，同年九月进入大连理工大学硕博连读，于 2018 年 9 月转为博士。目前博士在读。主要研究方向为二维材料的非线性光学性质，边缘重构，以及表面水吸附。已发表的文章有：J. Phys. Chem. C 2021, 125, 667–674; Nanoscale 2021, 13, 5479-5488; J. Phys. Chem. Lett. 2021, 12, 25, 5879–5888; Chin Sci Bull, 2021, 66: 685–700; J. Phys. Chem. Lett. 2019, 10, 3998–4002.



## 报告题目: Understanding the organic photovoltaic properties of the fused ring electron acceptor with decacyclic core

报告人: 杨兵 张材荣\*

兰州理工大学 [1183323737@qq.com](mailto:1183323737@qq.com)

### 摘要:

Understanding photovoltaic properties is fundamental basis for developing novel electron donor and acceptor materials of organic photovoltaics (OPVs). Up to now, non-fullerene acceptors become very promising because of many merits, such as the enhancements of intramolecular charge transfer (CT) and intermolecular interactions by expanding the  $\pi$ -conjugation of backbone with fused ring. Extending  $\pi$ -conjugated space of the fused ring backbone in non-fullerene acceptors is a common way to broaden absorption spectrum. The smaller bandgap and higher charge mobility of active layer materials enhance the CT rate of OPVs. Recently, the non-fullerene acceptor fusing naphtho[1,2-b:5,6-b']dithiophene with two thieno[3,2-b]thiophene (IDCIC) and the polymer donor fluorobenzotriazole (FTAZ) were synthesized, and the fabricated OPV reached the PCE of 13.58%. In this work, to understand photovoltaic properties, we studied the electronic structures and related properties of IDCIC, FTAZ, and FTAZ/IDCIC complex that is the interface model for heterojunction. The calculated results indicated that they have small optical bandgap of 1.50 eV, agreeing well with that of experiments (1.45 eV). The absorption spectra of IDCIC and FTAZ revealed that their absorption ranges are complementary. The complexes have good absorption properties in both the visible and near-infrared regions, which are favorable for effectively collecting sunlight and contributing to a high short-circuit current density. The CT and exciton dissociation (ED) rates were calculated using Marcus theory. According to the electrostatic potential, the remarkable difference of electrostatic potential between the molecular surfaces of the donor and acceptor are favorable to the CT and ED processes.

### 参考文献:

- [1] Dan He, Fu-Wen Zhao, Jing-Ming Xin, et al. *Adv. Energy Mater.*, 2019, 8 (30), 1802050.
- [2] Rui-Rong Bai, Cai-Rong Zhang, You-Zhi Wu, et al. *J. Phys. Chem. A*, 2019, 123 (18), 4034-4047.
- [3] Rui-Rong Bai, Cai-Rong Zhang, You-Zhi Wu, et al. *Int. J. Quantum Chem.*, 2020, 120 (4), e26103.
- [4] Rui-Rong Bai, Cai-Rong Zhang, You-Zhi Wu, et al. *New J. Chem.*, 2020, 44 (14), 5224-5234.
- [5] Rui-Rong Bai, Cai-Rong Zhang, Zi-Jiang Liu, et al. *J. Photochem. Photobiol. A*, 2021, 412, 113225.

### 个人简介:

杨兵, 兰州理工大学原子与分子物理专业 2019 级硕士研究生, 导师张材荣教授。主要研究方向为有机光伏活性层材料分子工程的理论研究, 目前在修改论文 1 篇, 另有 1 篇在写。联系电话: 18297611599, 电子邮箱: [1183323737@qq.com](mailto:1183323737@qq.com)。



## 报告题目：金属二硼化物中的长寿命的等离子激元模和增强的 超导特性

报告人：高涵 赵明文\*

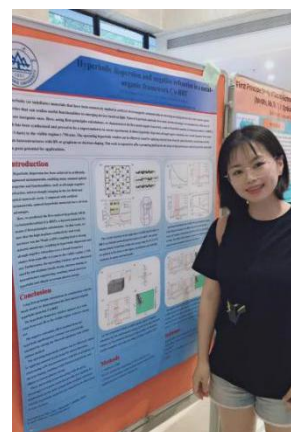
山东大学 244728082@qq.com

### 摘要：

利用第一性原理计算，我们系统地研究了二硼化物( $\text{BeB}_2$ ,  $\text{MgB}_2$ ,  $\text{CaB}_2$ ,  $\text{AlB}_2$ )中低能激发和超导性质。我们发现在这些二硼化物中，普遍都存在一条长寿命的余弦状的等离子激元，而且这条等离子激元与局域场效应密切相关。除此之外，在除  $\text{AlB}_2$  之外的其他二硼化物中，我们还发现了一条正弦状的声学等离子激元。在施加空穴掺杂之后，我们发现  $\text{AlB}_2$  也出现了正弦状的声学等离子激元， $\text{CaB}_2$  还出现了一条可传播到第一布里渊区之外的无色散的等离子激元分支。通过计算材料的超导性质，我们发现声学等离子激元能量与  $E_{2g}$  声子模呈现出一种正相关的关系，与超导温度  $T_c$  呈现出一种负相关的关系。

### 个人简介：

高涵，就读于山东大学物理学院赵明文课题组，博士二年级学生。研究的主要方向是，利用第一性原理方法，对材料的光学性质和等离子激元性质进行计算和模拟，寻找性能优异的双曲线材料和等离子激元材料。在 *Optics Express*, *New Journal of Physics* 等期刊上以第一作者的身份发表文章 5 篇。



## 报告题目: Dirac Semimetals in Homogeneous Holey Carbon Nitride Monolayers

报告人: 谭锐 孙立忠\*

湘潭大学 [tanrui@smail.xtu.edu.cn](mailto:tanrui@smail.xtu.edu.cn)

### 摘要:

We propose four novel holey carbon nitride monolayer  $C_7N_3$ ,  $C_{10}N_3$ ,  $C_{13}N_3$ , and  $C_{19}N_3$  stoichiometries intriguingly behaving as ideal two-dimensional (2D) Dirac semimetals whose Dirac cones are rightly located at the Fermi level. Moreover, the results of Gibbs free energies, phonon dispersions, ab initio molecular dynamics, and linear elastic constants indicate that their stabilities are comparable with the already-synthesized 2D carbon nitride materials. The Dirac cones of the systems originate from the hopping between all  $p_z$  orbitals of the C and N atoms. The theory of elementary band representation indicates that the Dirac cones of the systems come from the time-reversal forced twofold degeneracy at  $K$  and  $K'$  points. Furthermore, we find that the Dirac cones of the systems are robust against the spin-orbit coupling and external strain. Considering their excellent conductivity as Dirac semimetals, the four holey carbon nitride monolayers are potential candidates for the applications in future high-performance electronic devices.

### 个人简介:

谭锐, 湘潭大学 2018 级博士研究生, 导师为孙立忠教授。近年来围绕新型拓扑半金属材料 and 热电材料开展了一系列研究, 取得了相应的原创新成果。近 5 年来, 在 *J. Phys. Chem. C*, *J. Alloys. Compd.* 等期刊上发表学术论文 4 篇。主持湖南省研究生科研创新项目 1 项。



## 报告题目：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

报告人：夏明月 高峻峰\*

大连理工大学 13674741659@mail.dlut.edu.cn

### 摘要：

磷烯纳米带(PNR)的性质强烈地依赖于边缘构型。最近的研究发现在 PNR 的锯齿形边缘(ZZ[Tube])进行管状重构，可以形成能量最低且具有半导体性质的磷烯纳米带。最重要的是，ZZ[Tube]的电子结构与实验 STM 非常吻合。因此，应该重新考虑对 PNR 的研究。在本文中，通过第一性原理计算，我们系统地研究了不同边缘结构(包括 ZZ[Tube], ZZ 和 ZZ[ad]边缘)的之字形 PNR 受宽度和应变的影响。ZZ PNR 总是具有很小的带隙，几乎不依赖于纳米带的宽度和应变。ZZ[ad] PNR 中存在明显的带隙，它的带隙随纳米带宽度的减小而增加，但对应变不敏感。相反，随着纳米带的宽度从 12 Å 增大到 65 Å, ZZ[Tube] PNR 的带隙从 1.08 eV 降低到 0.70 eV。在-5%到 4%的应变范围下, ZZ[Tube] PNR 的带隙(0.13-1.18 eV)显示出线性响应，并且它的光吸收范围覆盖了近红外和远红外。除此之外，ZZ[Tube] PNR 的载流子有效质量(电子为 0.42  $m_0$ ，空穴为 1.24  $m_0$ )远低于 ZZ[ad] PNR。ZZ[Tube] PNR 的导带和价带处的电荷在空间上分离的很明显，即使在-5%到 4%的应变范围内，仍然强烈地保持这种特性。通过从头算分子动力学，我们定性地模拟出 ZZ[Tube] PNR 在应变行为下仍然是稳定状态。这些性质表明 ZZ[Tube] PNR 在微电子和光电应用中具有潜在的优异性能。

### 个人简介：

夏明月，2018 年于内蒙古大学获得学士学位，同年进入大连理工大学攻读博士学位，主要研究内容是磷烯纳米带边缘重构的性质。在赵纪军教授和高峻峰教授的悉心指导下，于《nanoscale advance》杂志上发表了一篇文章，同时与实验合作的一篇文章已经被《nature communication》接收。





## 墙报题目: The Defect Chemistry of Carbon Frameworks for Regulating the Lithium Nucleation and Growth Behaviors in Lithium Metal Anodes

作者: 马霞霞 张强\*

清华大学 [maxiaxia@foxmail.com](mailto:maxiaxia@foxmail.com)

摘要:

Carbon materials have been widely considered as the frameworks in lithium (Li) metal anodes due to their lightweight, high electrical conductivity, and large specific surface area. Various heteroatom-doping strategies have been developed to enhance the lithiophilicity of carbon frameworks, thus rendering a uniform Li nucleation in working Li metal batteries. However, various defects are inevitably introduced into carbon materials during synthesis and their critical role in regulating Li nucleation and growth behaviors is less understood. In this contribution, the defect chemistry of carbon materials in Li metal anodes is investigated through first-principles calculations. The Li atom binding energy and the critical current density are two key descriptors to reveal the defect chemistry of carbon materials. Consequently, the Stone–Wales defect is predicted to possess the best performance for delivering a uniform Li deposition. This work uncovers the defect chemistry of carbon frameworks and affords fruitful insights into defect engineering for achieving dendrite-free Li metal anodes.

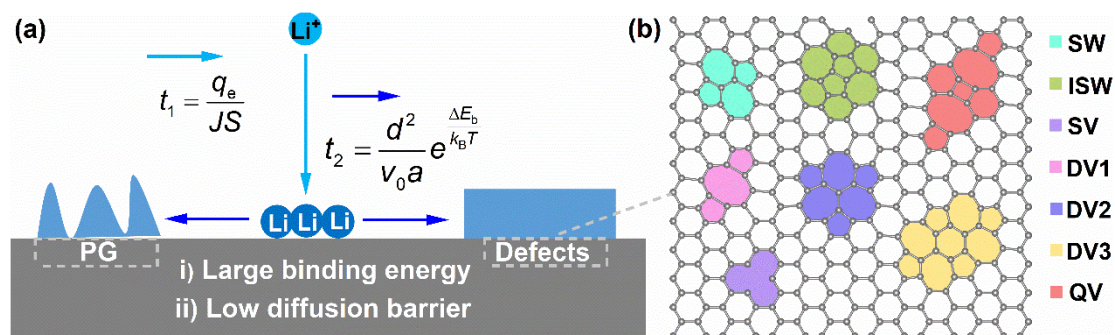


图 1. Schematic of Li nucleation and growth on carbon frameworks. a) The deposition of Li ions on pristine graphene (PG) and graphene with various defects. b) Modeling of defective graphene.

**墙报题目: Theoretical investigations on two-dimensional carbon-based materials as cathode catalysts in lithium oxygen batteries**

**作者: 董慧龙\***

常熟理工学院 *hldong@cslg.edu.cn*

**摘要:**

The development of high-performance cathode catalysts are vital for practical applications of nonaqueous lithium-oxygen (Li-O<sub>2</sub>) batteries. During the past years, we have performed theoretical investigations on the two-dimensional (2D) carbon-based materials as cathode catalysts in Li-O<sub>2</sub> batteries, such as SL-SiC, g-GeC, BC<sub>3</sub>, single-sided fluoride graphene (SSF-Gr), etc. The 2D carbon-based materials shows four-electron pathway during the discharge process, with the catalytic activity relies on the binding of Li or LiO<sub>2</sub>. Due to the low discharge/charge overpotential calculated, they have exhibited great potential for practical applications in Li-O<sub>2</sub> batteries.

**墙报题目: Theoretical design of nitrogen-doped graphene supported Platinum single-atom for full ammonia borane hydrolysis**

**作者: 巩兵兵 张文华\***

中国科学技术大学 [1946453126@qq.com](mailto:1946453126@qq.com)

**摘要:**

The hydrolysis of ammonia borane ( $\text{NH}_3\text{BH}_3$  or AB) at room temperature is a promising method for hydrogen production. Density functional theory (DFT) calculations were carried out to simulate the reaction mechanism of full hydrolysis of ammonia borane, which catalyzed by single Pt atom supported on nitrogen-doped graphene ( $\text{Pt}_1\text{-C}_x\text{N}_y$ ,  $x, y$  is the number of carbon atom and nitrogen atom that coordinated with platinum atom). Firstly, this work manifest the possible reaction pathways of  $\text{NH}_3\text{BH}_3$  hydroxylating to  $\text{NH}_3\text{B}(\text{OH})_3$  on  $\text{Pt}_1\text{-C}_2\text{N}_1$  as a consultation. Mechanism searching indicates there are two possible pathways on  $\text{Pt}_1\text{-C}_2\text{N}_1$ , both of which indicate the rate-limiting step is the first H atom dissociating from  $-\text{BH}_3$  side of  $\text{NH}_3\text{BH}_3$  with an energy barrier of 0.68 eV. Moreover, through three screening procedures, this study presents that  $\text{Pt}_1\text{-C}_1\text{N}_2$  shows better performance in catalyzing the full hydrolysis of AB. On  $\text{Pt}_1\text{-C}_1\text{N}_2$  which H atoms tend to pre-cover on, the rate-limiting step is introducing the second  $\text{H}_2\text{O}$  molecule. More importantly, the energy barrier of rate-limiting step on  $\text{HPt}_1\text{-C}_1\text{N}_2$  is 0.60 eV, which is 0.08 eV lower than that on  $\text{Pt}_1\text{-C}_2\text{N}_1$ . The great performance of  $\text{Pt}_1\text{-C}_1\text{N}_2$  and  $\text{Pt}_1\text{-C}_2\text{N}_1$  in the hydrolysis of ammonia borane at room temperature show a bright future in the application of hydrogen.

**墙报题目：二维晶格中稳定的谷-层耦合及设计理念**

**作者：徐熙龙 马衍东\***

山东大学 [xuxilong@mail.sdu.edu.cn](mailto:xuxilong@mail.sdu.edu.cn)

**摘要：**

可以对抗自旋轨道耦合（SOC）的稳定谷-层耦合，为二维能谷电子学提供了一种新的设计理念，具有重要的基础和技术意义；然而，实现这一目标的可靠机制却是缺失的。本文从对称性分析出发，提出了设计这种谷-层耦合的一般性原则。当满足依赖于反演中心的层间特殊对称操作时，双层晶格中可以出现具有谷-层对比物理和保护谷-层耦合的简并能谷。在基于紧束缚模型和第一性原理计算下的  $\text{MnF}_4$  材料中进一步揭示了这种谷-层耦合及其对 SOC 的稳定性。同时，在这种独特的体系中也观察到了许多特殊的性质，例如谷的光学选择性和层间激子的电极化。我们的结果不仅为设计具有稳定谷-层耦合的材料提供了一个可行的原则，而且极大地丰富了二维能谷电子学的物理内容，开拓了它的科学意义。

**墙报题目: Quantum Anomalous Hall Effect of Dirac Half-metal  
Monolayer TiCl<sub>3</sub> with High Chern Number**

作者: 刘泽 李佳\*

河北工业大学 *1241399517@qq.com*

**摘要:**

Based on the first-principles calculations, the monolayer TiCl<sub>3</sub> is predicted to a 100% spin-polarized Dirac half-metal with ferromagnetic Curie temperature  $T_c$  of 63 K as predicted by using Monte Carlo simulations. Given the spin-orbit coupling, the electronic structure of the monolayer TiCl<sub>3</sub> opens a  $\sim 3$  meV band gap. Result from the calculation of the anomalous Hall conductivity shows the Chern number  $C=3$ , indicating that three corresponding gapless chiral edge states have emerged inside the bulk gap. The density functional theory (DFT) +U calculations reveal that the monolayer TiCl<sub>3</sub> undergoes a transition from the topological non-trivial phase to the trivial Mott insulator with the increasing on-site Hubbard Coulomb interaction  $U$  from 0 eV to 0.6 eV. Our findings suggest a feasible new member of the quantum anomalous Hall insulator family with promising applications in spintronic devices without dissipation edge states.

**墙报题目: Strain and electric field tuned electronic and photoelectric properties of SeWS/h-BP van der Waals heterostructures**

**作者: 魏东 戴宪起\***

河南师范大学 *weidong233@126.com*

**摘要:**

Van der Waals (vdW) heterostructures have attracted attention for their ability to integrate the excellent properties of laminated materials. We discovered theoretically that the SeWS/h-BP hetero-structure has a typical type I band alignment, the interlayer electron-hole complex can be super-fast, thus enabling the design of highly efficient light-emitting devices. The SWSe/h-BP hetero-structure is a typical type II band alignment, which is conducive to further reduce the electron-hole complexation and increasing the exciton lifetime. Importantly, its energy conversion efficiency can reach 20.68%, making it a candidate material for 2D exciton solar cells. They exhibit high optical absorption coefficients ( $\sim 10^4$ ), broad absorption spectra, and good carrier mobility ( $\sim 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ). Both electric field and biaxial strain are able to tune the values of bandgap, band alignment and optical properties. Exploring the transfer function of the heterostructure reveals that when the bias voltage is greater than the threshold voltage, the current tends to increase with the voltage and the current magnitude can reach the level of  $\mu\text{A}$ . The SWSe/h-BP heterostructure presents a significant negative differential resistance (NDR) with a peak-to-valley ratio of 1.12 (1.18). These results indicate that our theoretical research provides good candidates for the next generation of optoelectronic products, nanodevices and solar cells.



**墙报题目: Molecular Mechanisms and Atmospheric Implications  
of Criegee Intermediate-Alcohol Chemistry in the Gas Phase  
and Aqueous Surface Environments**

**作者: 唐博 李震宇\***

中国科学技术大学 *tb950106@mail.ustc.edu.cn*

**摘要:**

Criegee intermediates and alcohols are important species in atmosphere. In this study, we use quantum chemistry and Born-Oppenheimer molecular dynamics (BOMD) simulations to investigate the reaction between methanol/ethanol and Criegee intermediates (anti- or syn-CH<sub>3</sub>CHOO) in the gas phase and at the air-water interface. Reactions at the interface are found to be much faster than those in the gas phase. When water molecules are available, loop structures can be formed to facilitate the reaction. In addition, non-loop reaction pathways characterized by the formation of hydrated proton, although with a low possibility, are also identified at the air-water interface. Implications of our results on the fate of Criegee intermediates in atmosphere are discussed, which deepen our understanding of Criegee intermediate-alcohol chemistry in humid environments.

**墙报题目: Efficient Direct Band Gap Photovoltaic Material  
Predicted Via  
Doping Double Perovskites  $\text{Cs}_2\text{AgBiX}_6$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ )**

**作者: 马鑫波 李震宇**

中国科学技术大学 [841508609@qq.com](mailto:841508609@qq.com)

**摘要:**

Double perovskites are proposed as a Pb-free substitution of toxic lead-halide perovskite photovoltaic materials. Unfortunately, they are usually either unstable or with an undesirable electronic structure. In this study, we start from a stable double perovskite,  $\text{Cs}_2\text{AgBiX}_6$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ ), which has a large and indirect band gap. Based on first-principle calculations, we find that a transition from indirect to direct band gap can be realized via doping  $\text{Sn}^{2+}$  ( $\text{Ge}^{2+}$ ) with occupied 5s (4s) orbitals. At the same time, the band gap decreases to a value suitable for photovoltaic applications. The optical absorption is largely enhanced and the exciton binding energy is also significantly reduced upon doping. These effects lead to high power conversion efficiencies. For example, the efficiency of Ge-Te codoped  $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$  is 31.4%, which is the highest among all known nontoxic stable halide perovskite materials. Results presented here open a new avenue for photovoltaic material design.

**墙报题目: Sulfur stabilizing metal nanoclusters on carbons at high temperatures**

**作者: 罗霄 武晓君\***

中国科学技术大学 *lx8916@mail.ustc.edu.cn*

**摘要:**

Supported metal nanoclusters consisting of several dozen atoms are highly attractive for heterogeneous catalysis with unique catalytic properties. However, the metal nanocluster catalysts face the challenges of thermal sintering and consequent deactivation owing to their thermodynamic instability particularly for high-temperature reactions. Here, we report that sulfur—a documented poison reagent for metal catalysts—when doped in carbon matrix can stabilize ~1 nm metal nanoclusters (Pt, Ru, Rh, Os, and Ir) at high temperatures up to 700 °C in a reducing atmosphere. We find that the enhanced adhesion strength between the metal nanoclusters and the sulfur-doped carbon supports, which arises from the interfacial metal-sulfur bonding, greatly retards both the metal atom diffusion and the nanocluster coalescence. The resulting Pt nanocluster catalyst exhibit outstanding selectivity of ~ 98% to propylene as well as long durability for 1800 min in the high-temperature propane dehydrogenation at 550 °C.

**墙报题目：Pb-WSe<sub>2</sub> 吸附体系中非常规的 Rashba 型和 Zeeman  
型自旋劈裂**

**作者：毛秀娟 李佳\***

河北工业大学 1499894209@qq.com

**摘要：**

通过第一性原理计算，我们发现 Pb-WSe<sub>2</sub> 吸附体系在考虑自旋轨道耦合下可以同时存在非常规的 Rashba 型和 Zeeman 型自旋劈裂。在布里渊区中心 $\Gamma$ 点的左右两侧，两条能带分支呈现相同的自旋极化方向（左或右），且两侧的 Rashba 能带分支的自旋极化相反。此外，对于第二种吸附构型 h2，Rashba 能带的两个分支存在自旋极化的反转，在自旋极化反转附近观察到一个排斥带隙，该带隙可以通过施加电压从而产生非耗散的自旋流。h2 构型在双轴应变为-8%到 6%的范围内，排斥带隙和 Rashba 参数可以被有效的调控。另外，通过改变 Pb 原子与相邻 Se 原子层之间的吸附距离 d，可以观察到一些有趣的现象，例如 d 的减小可以导致 Rashba 型向 Zeeman 型自旋劈裂的转变。因此，Pb-WSe<sub>2</sub> 吸附体系在自旋电子学和光电子器件中具有应用价值。

## 墙报题目：铁电-顺电转换对二维铁电材料光解水性能的调控

作者：鞠林\*

安阳师范学院 [sdu\\_JL@163.com](mailto:sdu_JL@163.com)

### 摘要：

探寻有效的调控手段来提高光解水催化剂的催化性能一直是光催化领域的研究热点。目前采用的调控手段主要是通过能带调节工程，提高催化剂的光利用率。然而，对催化反应进行有效调控的手段尚欠缺。本工作通过第一性原理计算，首次发现铁电-顺电相变可以很好地调节  $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$  单层的光催化活性（如图 1 所示），从而控制其光催化反应。具体来说，铁电相  $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$  单层的光生空穴具有较高的氧化电势，从而使其具有较强的氧化反应驱动力，反应动力学的计算结果表明，铁电相  $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$  单层甚至可以在酸性环境下自发地将水氧化成氧气，是一种非常出色的光解水氧化剂。而顺电相该材料的光生电子则具有较高的还原电势，从而使其具有较强的还原反应驱动力。在酸性溶液中，小的压缩形变就可以使其自发地将水中质子还原成氢气。此外，通过铁电转换可以对  $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$  单层的太阳能-氢能转换效率进行调节，由于载流子利用率更高，在铁电相上转换效率高达 10.04%，而在顺电相上转换效率仅为 6.66%。另外，两种相下  $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$  单层以及其类似化合物（ $\text{CuBiP}_2\text{Se}_6$ ,  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$ ,  $\text{AgBiP}_2\text{S}_6$ ）单层的极子结合能的计算结果表明，铁电相下的该类化合物具有较高的极子结合能，这表明铁电转换可以对该类化合物的极子结合能进行定向调控。该项理论研究不仅揭示了铁电化对光解水催化性质的重要性，而且为将来通过铁电转换改善二维铁电材料的光催化性能提供了理论依据。

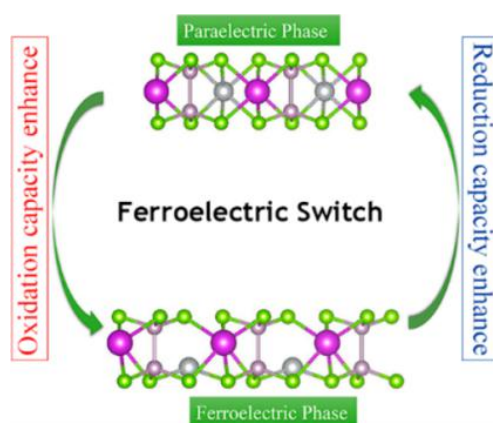


图 1 铁电-顺电转换对  $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$  单层光解水性能的调控

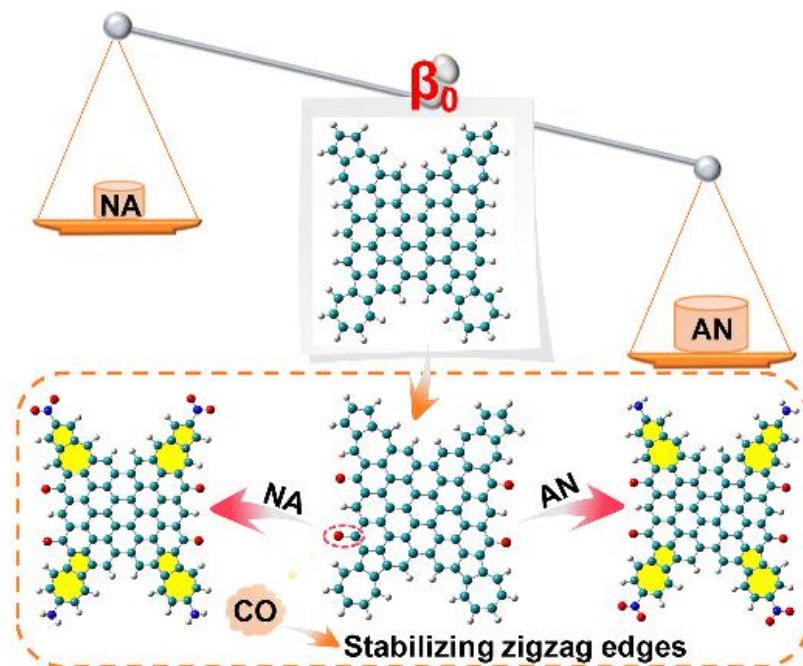
## 墙报题目：X 型石墨烯纳米带的二阶非线性光学性质的 理论研究

作者：杨翠翠 田维全\*

重庆大学 2516064128@qq.com

### 摘要：

碳基石墨烯纳米带(GNRs)由于其独特的光电特性，使其在光电子工业中非线性光学(NLO)方面有着广泛的应用前景。然而，原生石墨烯的匀质性及非极性，其二阶 NLO 性质较弱，由此，设计了新型的含萸缺陷的 X 型 GNRs，以诱导电荷重新分布，并利用量子化学方法及态求和模型预测了其二阶 NLO 性质。引入羰基(CO)来精准调控和稳定 GNRs 的锯齿型边缘态，为获得具有稳定锯齿型边缘和可调电子性能的 GNRs 提供一种可行的策略。进一步在 GNRs 的四端引入给电子基  $\text{NH}_2$  和吸电子基  $\text{NO}_2$ ，通过改变这些官能团的连接方式显著提高其 NLO 性质。探寻碳基纳米材料的结构与性质的关联，为实验研究提供建设性建议。





## 墙报题目：液态电解质介电常数变化的化学本质与微观机制

作者：姚楠 张强\*

清华大学 [yn20@mails.tsinghua.edu.cn](mailto:yn20@mails.tsinghua.edu.cn)

### 摘要：

介电常数是电解质的重要物化性质之一，其对溶质和溶剂间相互作用以及溶剂化结构存在重要影响，因而受到广泛研究关注。对电解质介电常数进行准确描述和调控有助于对微观分子间相互作用和宏观电解质性质进行理性设计。但电解质组分多变，从实验上一一测量各种电解液的介电常数有一定难度且成本较高。我们的工作以锂电池中常用的电解液体系为例，采用分子动力学模拟的方法探究环境温度以及电解质组分变化对介电常数的影响，并从分子尺度对介电常数变化的化学本质和微观机制予以解释。具体而言，溶剂介电常数随温度升高而减小，这主要是由于高温下分子运动加快，排布更加无序，体系偶极矩减小，因此介电常数减小。该变化规律还可用类阿伦尼乌斯公式描述。混合溶剂的介电常数存在线性变化和满足多项式模型的变化这两种不同的趋势，不同的变化趋势与分子间相互作用的强弱密切相关。随着盐类的加入，电解液的介电常数先增后减。一方面，盐类自身具有偶极矩，能够使介电常数增大；另一方面，盐被溶剂解离形成溶剂化结构，这会对溶剂分子的排布产生影响，溶剂分子在离子周围呈向心分布，偶极矩相互抵消因而介电常数随之减小。这两方面效应的叠加使得介电常数呈现先增后减的火山型变化趋势。而高盐体系中引入的稀释剂对上述两方面效应均没有明显影响，因此其类似具有较高介电常数的溶剂与原先电解质混合，使体系的介电常数升高。我们的工作对液态电解质介电常数变化的化学本质与微观机制进行了深入探究，有利于理性、高通量设计和筛选性能优良的电解质。本工作中采用的方法以及得到的结论在其他溶液体系的研究中也具有适用性。

**墙报题目: Gas Detection for NO<sub>2</sub> and SO<sub>2</sub> Based on Tape- Heme  
Monolayer**

**作者: 郭高甫 戴宪起\***

河南师范大学 *gfguo97@163.com*

**摘要:**

First principles calculations based on spin-polarized density functional theory (DFT) has been used here to investigate the structural, electronic and magnetic properties of tape-heme monolayer (THM) with gas molecules (H<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub>, HCN, NH<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub> and SO<sub>2</sub>) adsorption. Our results suggest that H<sub>2</sub>O and NH<sub>3</sub> are physisorbed on THM while N<sub>2</sub>, HCN, NO<sub>2</sub> and SO<sub>2</sub> are adsorbed on THM by chemisorption. The toxic HCN, NH<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub> and SO<sub>2</sub> can be effectively captured by THM according to their adsorption energy ( $> 0.50\text{eV}$ ). The adsorption of NO<sub>2</sub> (or SO<sub>2</sub>) can partly (or completely) decrease the spin moment of THM and induce the transition from metallic property into half-metallic (or semiconductor) behavior. Our findings reveal that THM could effectively detect toxic: NO<sub>2</sub> and SO<sub>2</sub> in environment with high sensitivity and selectivity and reactivity, indicating that it possesses a potential application in the field of heme-based gas sensors.

## 墙报题目：硅基 $MSi_2N_4$ ( $M = Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo$ 和 $W$ )

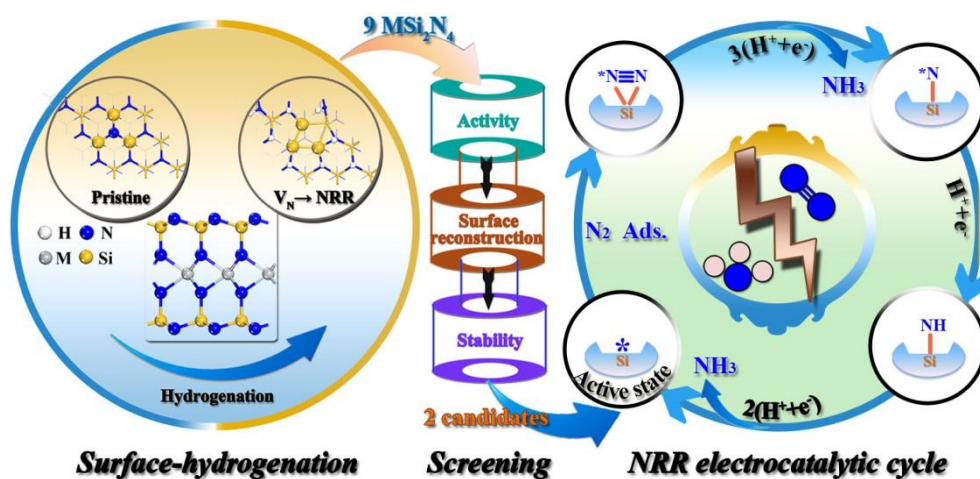
### 单层膜中有效 NRR 电催化剂的筛选

作者：罗瑶 黄玉成\*

安徽师范大学 [luoy@ahnu.edu.cn](mailto:luoy@ahnu.edu.cn)

#### 摘要：

最近,《科学》杂志报道了一种通过化学气相沉积法(CVD)合成的新型厘米级  $MoSi_2N_4$  单层膜(Science 2020, 369, 670)。其次表层 Si 原子已被认为是固定  $N_2$  的活性相,因此,在本文中我们通过密度泛函理论,系统地评估了在一系列  $MSi_2N_4$  ( $M = Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo$  和  $W$ ) 单层膜上电化学  $N_2$  还原反应(NRR)。结构分析发现应首先产生 N 空位以暴露出活性 Si 原子,此过程在初始表面上有较高的能量消耗,而在预氢化后的表面能量消耗极低,更有利形成 N 空位。随后通过三步筛选,预测  $TiSi_2N_4$  和  $TaSi_2N_4$  单层是极有潜力的电催化剂,因为它们可以(i)成功地捕获  $N_2$ ,(ii)经过一轮催化循环后能有效地恢复到初始活性态,而不会产生强烈的表面重建,以及(iii)在高温下良好的稳定性。此外,系统的 NRR 机制研究表明,NRR 过程是通过 Mars-van Krevelen 机制进行的,其中  $TiSi_2N_4$  和  $TaSi_2N_4$  的极限电势分别仅为-0.41 和-0.46V。



## 墙报题目：Cr<sub>2</sub>C MXene 材料电子性质和磁性的第一性原理研究

作者：孙倩 杨宗献\*

河南师范大学 [sunqian1007@126.com](mailto:sunqian1007@126.com)

### 摘要：

与石墨烯结构相似的二维过渡金属碳化物和氮化物 (MXenes) 是二维材料世界中的一个新成员，它是由多种元素组成的复合层状结构，有着二维材料典型的特性。我们使用基于密度泛函理论的第一性原理方法，系统深入地研究了引入不同表面修饰、掺杂、外加应力等手段对 Cr<sub>2</sub>C MXene 的电子性质和磁性的影响，得出了以下创新性的结果。

在 Cr<sub>2</sub>C 合成过程中引入表面官能团作为化学掺杂剂，会对其电子性质和磁性产生较大影响，Cr<sub>2</sub>CX<sub>2</sub> (X = O, F, OH) 的电子结构有从金属态到绝缘态的转变。对半导体材料 Cr<sub>2</sub>CX<sub>2</sub> (X = F, OH) 引入掺杂，发现电子/空穴掺杂和 N 原子掺杂只改变了体系的电子性质，不改变磁性，而金属元素 (M=Ti, V, Mn, Fe, Co 和 Ni) 掺杂可以同时改变体系的电子性质和磁性。对 Cr<sub>2</sub>C 和 Cr<sub>2</sub>CX<sub>2</sub> 体系施加拉伸应变可以增强 Cr 原子的磁矩。随着应变的增加，电子结构也会受到影响，反铁磁半导体 Cr<sub>2</sub>CF<sub>2</sub> 和 Cr<sub>2</sub>C(OH)<sub>2</sub> 的带隙减小，铁磁导体 Cr<sub>2</sub>C 和 Cr<sub>2</sub>CO<sub>2</sub> 的上下自旋分裂增强。由不同官能团的 Cr<sub>2</sub>CX<sub>2</sub> 组成的 MoS<sub>2</sub>/Cr<sub>2</sub>CX<sub>2</sub> 异质结的电子结构有很大不同。MoS<sub>2</sub>/Cr<sub>2</sub>C 和 MoS<sub>2</sub>/Cr<sub>2</sub>CO<sub>2</sub> 是导体，而 MoS<sub>2</sub>/Cr<sub>2</sub>CF<sub>2</sub> 和 MoS<sub>2</sub>/Cr<sub>2</sub>C(OH)<sub>2</sub> 是半导体。因此，Cr<sub>2</sub>C MXene 是一种潜在的磁性可控材料，在自旋电子纳米器件中具有很大的应用潜力。

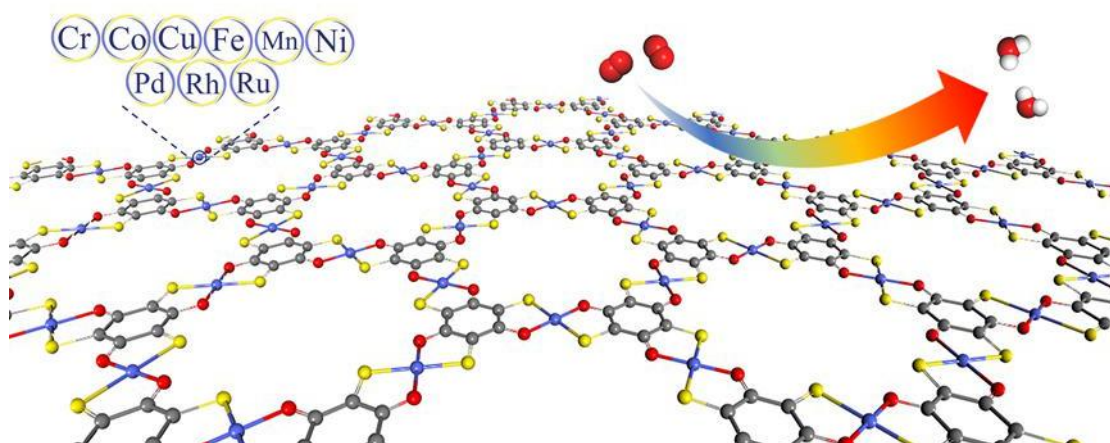
## 墙报题目：二维 $M_3(C_6S_3O_3)_2$ 作为导电氧还原反应(ORR) 催化剂

作者：李天春 荆宇\*

南京林业大学 [lrc@njfu.edu.cn](mailto:lrc@njfu.edu.cn)

### 摘要：

具有单原子催化剂特点的二维 (2D) 共轭金属有机框架 (MOF) 材料是促进氧还原反应 (ORR) 的有效电催化剂。通过密度泛函理论计算和微动力学模拟，我们设计了一系列新型的 2D-MOFs，即单层  $M_3(C_6S_3O_3)_2$  ( $M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Pd, Rh$  和  $Ru$ )，研究了它们作为 ORR 电催化剂的潜力。由于  $\pi$  共轭有机连接体 (1,3,5-三羟基苯-2,4,6-三硫醇) 和中心金属之间具有有效的轨道耦合，所有 2D  $M_3(C_6S_3O_3)_2$  均表现为金属性。由于杂化有机连接体的协同效应，我们设计的结构显示出良好的 ORR 催化活性，并且可以通过改变中心金属来调节其催化性能。其中， $Rh_3(C_6S_3O_3)_2$  表现出 0.81 V 的限制电位 (UL) 优于 Pt/C，是一种很有前景的 ORR 电催化剂，而  $Co_3(C_6S_3O_3)_2$ 、 $Fe_3(C_6S_3O_3)_2$  和  $Mn_3(C_6S_3O_3)_2$  显示出与 Pt/C 相当的 ORR 催化活性。我们的研究为设计高效 ORR 电催化剂提供了新的思路。



**墙报题目: Effects of inherent defects on the properties of  
2D BAs**

**作者: 余恒 戴宪起\***

河南师范大学 *Hengyu\_9804@163.com*

**摘要:**

Cubic boron arsenide has ultra-high thermal conductivity at room temperature, which is expected to be a candidate for a new generation of microelectronic devices, so it has attracted wide attention from researchers. The overall thermal conductivity of two-dimensional (2D) hexagonal boron arsenide is slightly lower than that of cubic boron arsenide, but it is still a material with great potential for thermal management. 2D BAs has been synthesized experimentally synthesized by molecular beam extension (MBE), some defects are inevitable during growth, which may have different effects on the properties of the material. Therefore, systematic study of 2D Bas in the seven inherent defects on the material electronic structure, magnetic properties and thermoelectric properties of the impact by means of density function theory (DFT) calculations. Theoretical calculations show that the defects all convert the system from semiconductor to metallicity, both vacancy defect and antisite defect make the system introduce magnetism, the novelty is that, the B s defect significantly improves the thermoelectric performance of the system. The theoretical results provide the basis for the application of 2D BAs in magnetic materials, microelectronic devices and thermoelectric materials.



**墙报题目： Two-dimensional GaN/WSe<sub>2</sub> van der Waals  
Heterostructures for electronic properties and photocatalytic**

**作者： 骆晴晴 戴宪起\***

河南师范大学 *qingqing123abc2021@163.com*

**摘要：**

The van der Waals hetrostructures (vdWHs) have received considerable attention because of exhibit outstanding properties can be applied in nano-devices. Using first principle calculations were performed to research the geometrical, electronic, and optical properties of the GaN/WSe<sub>2</sub> vdWHs. The different stacking configurations of the GaN and WSe<sub>2</sub> monolayers affect the band structures of the heterostructure. We chose three relative stability hetrostructures as study target, which are labled as AA, AB, and AC. AA is mainly used for compared. The three structures including type-I and Type-II heterostructures, all of them bandgap values are larger than 1.23eV and meet the conduction of photocatalytic water splitting. Their structural and electronic properties can be modulated under biaxial and external electric field (Efield). The change trends of their bandgaps are similar under biaxial strain. The interlayer van der Waals (vdW) interaction arousing the charge transfer, which is in favor of photocatalysis process. The result show that AC has better light absorption than AA and AB patterns. The three configurations have good light absorption in UV and visible-light regions, are fine candidate materials for photoelectronic applications.

## 墙报题目：二维过渡金属硼化物作为电催化剂的理论研究

作者：朱常岩 张珉\*

东北师范大学 [zhucy659@nenu.edu.cn](mailto:zhucy659@nenu.edu.cn)

### 摘要：

电催化技术以电能为直接驱动力，通过偏压及电荷转移加速电极与电解质界面上化学反应过程从而实现和提高底物的转化率。目前，最受关注的小分子电催化包括  $\text{CO}_2$  和  $\text{N}_2$  的电化学还原反应。我们借助 CALYPSO 结构搜索程序和第一性原理计算，以新型二维过渡金属硼化物作为高效催化剂，在  $\text{CO}$  电催化合成  $\text{C}_2$  产物和  $\text{N}_2$  电催化合成  $\text{NH}_3$  反应中进行如下探索：(1) 确认高稳定的含有多催化位点的  $\text{Ni}_2\text{B}_5$  单层结构，并从动力学和热力学角度论证了  $\text{CO}$  在不同位点之间的有效迁移对于 C-C 耦合以及后续的质子化合成多碳产物至关重要，并再次论证在多位点催化剂表面小分子的有效迁移是降低 C-C 键耦合能垒和提升催化活性不可忽略的重要前提。(2) 基于以往理论数据，以大尺寸且稳定的  $\text{B}_7$  单元作为基础构建单元，理论筛选出稳定的 12 种  $\text{MM}'\text{B}_7$  纯平面单层材料，通过分析  $\text{N}_2$  在吸附前后的键长变化值、电荷转移量和轨道布局等差异，提出并成功论证了含长距离的、异核的、双催化位点能够更有效地活化和极化 N-N 叁键并使其发生还原反应的观点。

**墙报题目： Bi-Atom Active Sites Embedded in A  
Two-Dimensional Covalent Organic Framework for Efficient  
Nitrogen Reduction Reaction**

**作者： 张志华 赵明文\***

山东大学 [2608977940@qq.com](mailto:2608977940@qq.com)

**摘要：**

An economical and environment-friendly approach for N<sub>2</sub> reduction reaction (NRR) under mild conditions is currently urgent. The synergetic reaction centers in bi-atom catalysts (BACs) are proposed to further boost reaction activity. On the basis of a newly-synthesized two-dimensional (2D) binuclear Cu-salphen covalent organic framework (COF), we predict four promising BACs for NRR with transition metal (TM) atoms (TM = Fe, Co, Mo, W and Ru) embedded in this COF. The low limiting potentials (-0.29 ~ -0.57 V) and high theoretical Faradaic efficiency (FE) (76 ~ 100%) of these BACs can be correlated to the asymmetrical charge depletion of metal dimers and the synergistic effect between the metal atoms and the 2D COF. The thermal stability and realistic feasibility of M<sub>1</sub>M<sub>2</sub>-COFs were also assessed. Our work offers a group of promising candidates of ultra-efficient COF-based NRR BACs, as well as a rational guidance for catalyst design.

**墙报题目: Ring Model: Structural Insights into the Interfacial Interactions between  $\text{SR}[\text{Au}(\text{SR})]_x$  ( $x = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) Protection Motifs and Gold Cores in Thiolate-Protected Gold Nanoclusters**

**作者: 韩文华 许文武\***

宁波大学 1911077013@nbu.edu.cn

**摘要:**

The structures of strong gold-sulfur(Au-S) covalent bond resulted thiolate-protected Au nanoclusters have received widespread attention in the past fifteen years. However unrevealing the structural insights into the interaction between  $\text{SR}[\text{Au}(\text{SR})]_x$  ( $x = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) protection motifs and gold cores in thiolate-protected gold nanoclusters remains a great challenge. In this communication, we identified a ring model by through the crystallized structural analyses on all the predicted thiolate-protected and gold nanoclusters, which could be decomposed into several  $[\text{Au}_m(\text{SR})_n]$  ( $m = 4-8, 10, 12$ , and  $0 \leq n \leq m$ ) rings fusing or interlocking together These  $[\text{Au}_m(\text{SR})_n]$  rings resulted aurophilic interactions play important role in stabilities of the thiolate-protected gold nanoclusters.

**墙报题目: Two-Dimensional Growth Mode of Thiolate-Protected  
Gold Nanoclusters**

作者: 刘鹏叶 许文武\*

宁波大学 1911077022@nbu.edu.cn

**摘要:**

First, six new atomic structures of thiolate-protected gold nanoclusters, ie.  $\text{Au}_{32}(\text{SR})_{20}$ ,  $\text{Au}_{40}(\text{SR})_{26}$ ,  $\text{Au}_{48}(\text{SR})_{30}$ , two  $\text{Au}_{56}(\text{SR})_{34}$ , and  $\text{Au}_{60}(\text{SR})_{36}$ , are predicted. Then, considering these six newly predicted structures and six previously predicted or crystallized structures altogether a two-dimensional (2D) growth mode of  $\text{Au}_{28+4n}(\text{SR})_{20+2n}$  ( $n = 0 - 8$ ) nanoclusters are completely presented to compare with their one-dimensional (1D) growth mode.

The growth of the gold cores is via sequentially fusing one tetrahedral  $\text{Au}_4$  unit by sharing one gold atom. And these six newly predicted gold nanoclusters following 2D growth mode have very close relative energies with their isomeric structures following 1D growth mode.

The complete presentation of the 2D growth mode of the  $\text{Au}_{28+4}(\text{SR})_{20+2n}$  ( $n = 0 - 8$ ) is not only beneficial for better understanding the structural growth of gold nanoclusters, but also a theoretical guidance on the prediction of new stable structures for experimental confirmations.

## 墙报题目: High-performance Spin Filters and Spin Field Effect

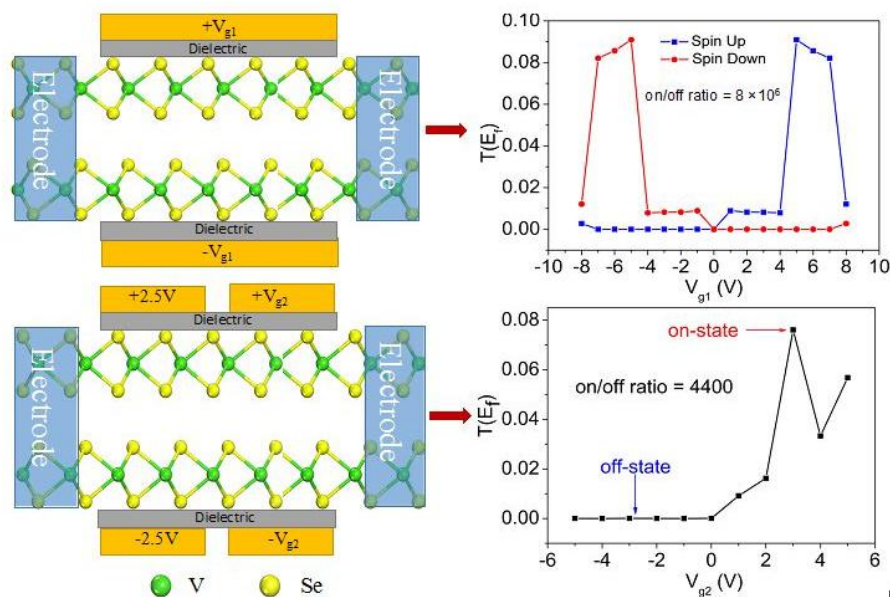
### Transistors Based on Bilayer VSe<sub>2</sub>

作者: 吴葆春 吕劲\*

北京大学 [zxwbc@pku.edu.cn](mailto:zxwbc@pku.edu.cn)

#### 摘要:

Recently, two-dimensional (2D) magnetic van der Waals materials have drawn great attention as they are remarkably promising in numerous vital areas, such as data storage and information processing. Theoretically, bilayer (BL) 2H-VSe<sub>2</sub> has been predicted to be an A-type 2D antiferromagnetic van der Waals crystal (intralayer ferromagnetism and interlayer antiferromagnetism) and to have electrically-induced half-metallicity. Herein, by using ab initio quantum transport simulations, we design BL 2H-VSe<sub>2</sub> spin devices and investigate the spinresolved transport properties for the first time. The spin-filter efficiency of the dual-gated BL 2H-VSe<sub>2</sub> spin filter reaches up to 99%, and the conductance on-off ratio of this device is up to 10<sup>6</sup>. Also, the conductance on-off ratio of the quadruple-gated BL 2H-VSe<sub>2</sub> spin field effect transistor can reach 4 × 10<sup>3</sup> after reversing the spin direction. Our work shows the high performance of the BL 2H-VSe<sub>2</sub> in spintronic devices and will motivate further studies of the spin devices based on this kind of material.





**墙报题目: Transition Metal Atoms (Fe, Co, Ni, Cu, Zn) Doped  
RuIr Surface for the Hydrogen Evolution Reaction: A  
First-Principles Study**

**作者: 任曼曼 黄世萍\***

北京化工大学 2020400014@mail.buct.edu.cn

**摘要:**

Electrochemical water splitting to produce hydrogen is an effective strategy to solve the energy shortage. Since hydrogen is easier to produce under acidic conditions, the development of electrocatalysts with high activity and stability is particularly important in acidic electrolytes. Based on this, we systematically studied the active sites of transition metal atoms doped RuIr(111) surface (TM-RuIr(111), TM= Fe, Co, Ni, Cu, Zn) for hydrogen evolution reaction (HER) through first-principles calculations. We find Zn-RuIr(111) has the best performance for HER and the Gibbs free energy change of the adsorbed H atom ( $\Delta G_{H^*}$ ) and exchange current reach -0.03 eV and  $1.68 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$ , which is superior than Pt(111). Crystal Orbital Hamilton Population (COHP) analysis shows the  $\Delta G_{H^*}$  of adsorption surface with the same configuration is negatively correlated with calculated bond energy. Further Bader charge analysis reveals the doping transition metal changes the electronic properties of Ru atom and Ir atom near the doping site, thereby activating the Ru adjacent to the doped site so that the best active site migrates from Ir to Ru atom. The synergistic effect of Ru and Ir atoms promotes the HER activity on the surface. Our work help to understand the internal mechanism regulating HER activity on the RuIr surface and guide the design and synthesis of high-activity TM-RuIr catalysts.

## 墙报题目：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

作者：王冰雪 付强\*

山东大学 201912169@mail.sdu.edu.cn

### 摘要：

在温和条件下将氮电化学还原为氨是一种很有前景的替代方案，可以替代在高温高压下运行的能源密集型 Haber-Bosch 工艺。了解催化过程和机制对于合理设计所需的电催化剂非常重要。在这项工作中，基于对石墨氮化碳 ( $g\text{-C}_3\text{N}_4$ ) 上双原子  $\text{Fe}_2$  物种的电催化氮还原反应 (NRR) 途径的详细研究，我们探索了一些调节  $\text{Fe}_2$  催化性能的外部手段。结果表明，对  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  衬底施加适当的拉伸应力或用带正电的 Na 原子掺杂  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  可以选择性地降低 NRR 的过电位，这两者都源于  $\text{N}_2$  吸附物的相对不稳定，但机制不同。在这里，前者通过几何效应打破了  $^*\text{N}_2$  和  $^*\text{HNN}$  吸附能之间的比例关系，而后者来自电荷效应。上述两种手段也可以提高 NRR 与析氢反应 (HER) 竞争的反应选择性。这项工作可能为设计和改进用于氮还原反应的电催化剂提供新的思路。

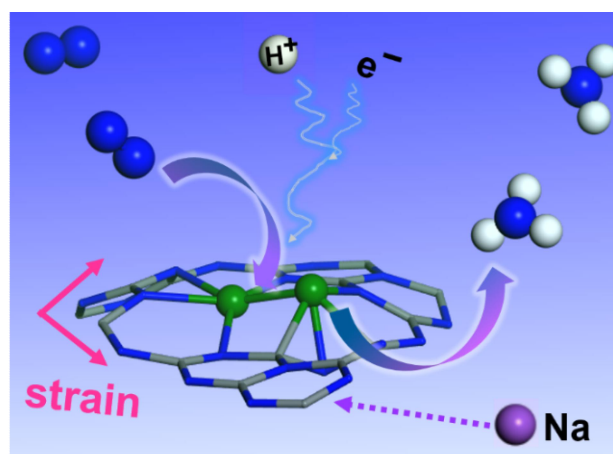


图 1:  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  上负载的  $\text{Fe}_2$  双原子催化剂

**墙报题目: Can ultra-thin Si FinFETs work well at the sub-10 nm gate-length region?**

**作者: 刘士琦 吕劲\***

北京大学 [1701110155@pku.edu.cn](mailto:1701110155@pku.edu.cn)

**摘要:**

Fin field-effect transistors (FinFETs) dominate the present Si FETs. However, when the gate length is scaled down to the sub-10 nm region, the experimental Si FinFETs suffer from poor performance due to a large fin width (the minimum value is 3 nm). In this paper, the ultra-thin Si FinFET with a width of 0.8 nm is investigated for the first time by utilizing ab initio quantum transport simulations. Remarkably, even the gate length down to 5 nm, the on-state current, delay time, power dissipation, and energy-delay product of the optimized perfect ultra-thin Si FinFET still meet the high-performance applications' requirements of the International Technology Roadmap for Semiconductors in the next decade. The overall performance of the simulated ultra-thin Si FinFET is even comparable with that of the typical two-dimensional FETs. Such a good performance can be significantly degraded by the defect. Hence, the Si FinFETs have the potential to be scaled down to the sub-10 nm gate length as long as the width is scaled down while keeping a perfect structure.

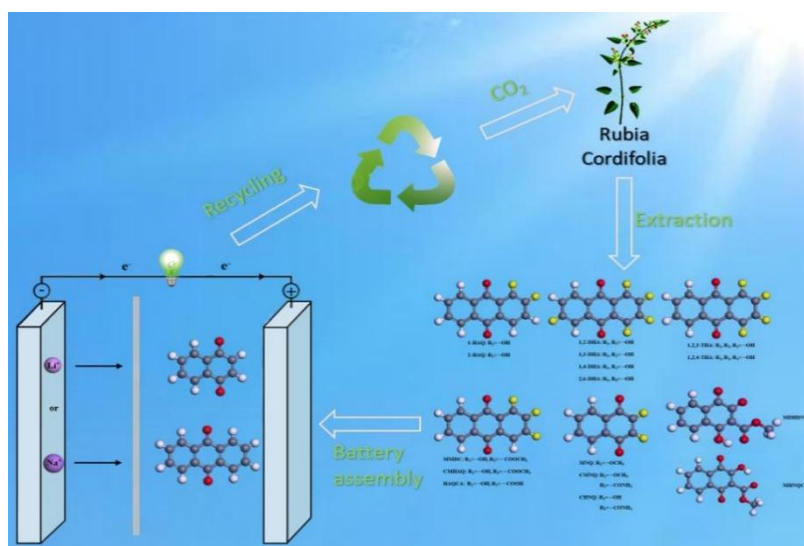
## 墙报题目：天然醌类分子作为固态金属电池电极材料的 理论研究

作者：朱欣悦 荆宇\*

南京林业大学 [yujing@njfu.edu.cn](mailto:yujing@njfu.edu.cn)

### 摘要：

利用生物质资源进行储能为缓解能源危机和环境污染提供了一种有前景的解决方案。通过第一性原理计算，我们探索了使用天然含羰基稠环芳族化合物，即天然醌分子作为锂离子电池（LIBs）和钠离子电池（SIBs）电极材料的潜力。通过考察反应位点和反应顺序，系统地研究了锂/钠的储存机理。发现不同的芳香性和不同的官能团（包括官能团位置的差异）是决定这些醌储锂/钠性能的影响因素。1,4-二羟基蒽醌（1,4-DHA）和 3-羟基-1,4-萘醌-2-羧酸甲酯（MHNQC）的天然醌衍生物表现出 223 和 231 mAh g<sup>-1</sup> 的高容量和高氧化还原电位分别为 2.50 V vs Li/Li<sup>+</sup> 和 2.76V vs Li/Li<sup>+</sup>，因此，有望成为潜在的固态 LIBs 电极材料。同时，MHNQC 具有较高的储钠电压(1.98V vs Na/Na<sup>+</sup>)，因而是一种较好的 SIBs 电极材料。



## 墙报题目：氢氘同位素效应对 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 钙钛矿电子空穴复合的影响

作者：赵熹 龙闰\*

北京师范大学 201921150083@mail.bnu.cn

### 摘要：

有机无机杂化钙钛矿由于其优异的光电特性，成为最具前途的光伏材料之一。目前，氢-氘同位素替换对钙钛矿载流子动力学的影响仍然存在争议。有研究认为氘化钙钛矿会增加体系的转动惯量，缩短载流子寿命。也有研究认为，氘化钙钛矿可以通过降低声子振动频率提高太阳能电池的稳定性和激发态寿命。针对这一争议，本文利用非绝热分子动力学模拟和含时密度泛函理论，研究了有机无机杂化钙钛矿  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  中氢氘交换对非辐射电子-空穴复合动力学过程的影响机制。模拟结果表明，氘代可以减弱电子和空穴波函数的重叠，降低非绝热耦合，从而有利于电子和空穴的分离，提高  $\text{CH}_3\text{ND}_3\text{PbI}_3$  和  $\text{CD}_3\text{ND}_3\text{PbI}_3$  的激发态寿命。除此之外，氘代可以降低声子模振动频率，抑制无机 Pb-I 骨架的运动，提升钙钛矿的结构稳定性。该模拟为同位素交换策略对钙钛矿非辐射电子-空穴复合的影响提供了详尽的物理机制，从而为设计高效率和高稳定性的钙钛矿器件提供了理论指导。

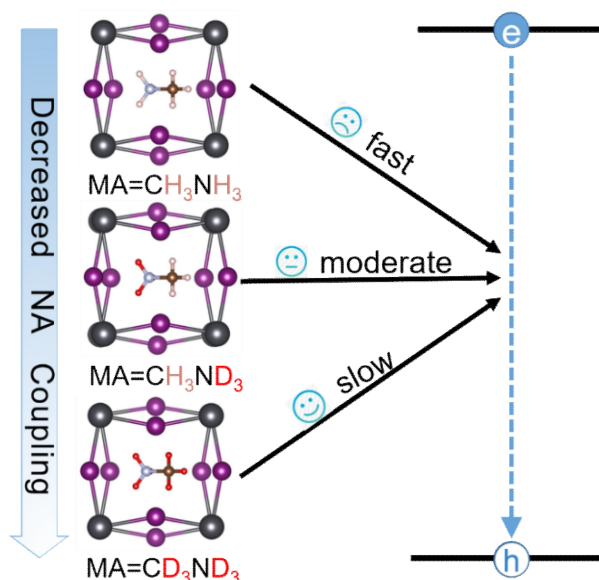


图 1. 氘代对  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  钙钛矿电子-空穴复合的影响示意图

**墙报题目：二维 Ruddlesden-Popper 钙钛矿中光激发载流子  
动力学研究**

**作者：代丹丹 龙闰\***

北京师范大学 *dandandai@163.com*

**摘要：**

二维 Ruddlesden-Popper 钙钛矿因其良好的水热稳定性受到了广泛的关注，与三维钙钛矿结构的容忍因子范围相比，其柔性的有机间隔阳离子可以承受大尺寸 A 位阳离子引起的结构形变，增大了容忍因子变化区间，增加了二维钙钛矿的种类，并对二维钙钛矿的光电性能产生了影响。实验表明，含有大尺寸 A 位阳离子的二维钙钛矿  $\text{HA}_2\text{GAPb}_2\text{I}_7$  光电转换效率和载流子寿命均低于  $\text{HA}_2\text{MAPb}_2\text{I}_7$ 。本文结合含时密度泛函理论和非绝热分子动力学模拟研究了  $\text{HA}_2\text{MAPb}_2\text{I}_7$  和  $\text{HA}_2\text{GAPb}_2\text{I}_7$  在从头算原子时域中的电子-空穴复合寿命。模拟结果表明，在  $\text{HA}_2\text{GAPb}_2\text{I}_7$  中的 GA 阳离子引起了八面体结构形变，并抑制了无机铅-碘骨架的波动，导致了较大的非绝热耦合和较慢的量子退相干，这对体系非辐射电子-空穴复合造成了不利影响。该研究为深入理解大尺寸 A 位阳离子与结构光电性能之间的关系和制备合理的二维 Ruddlesden-Popper 钙钛矿太阳能电池提供了理论指导。



## 墙报题目：二维 GeAs 与金属接触的界面性质的研究

作者：刘昊松 潘圆圆\*

中国石油大学 [Z19030046@s.upc.edu.cn](mailto:Z19030046@s.upc.edu.cn)

### 摘要：

具有各向异性电子特性的稳定二维（2D）半导体的发现对于未来电子技术的发展至关重要。通过使用从头计算法和量子输运模拟，研究了单层（ML） GeAs 与一系列 MXenes 和 Cu 在晶体管中的接触特性。当 ML GeAs 与 Cu 接触时会发生金属化，而金属化的 ML GeAs 将与沟道 ML GeAs 发生耦合作用。ML GeAs 在垂直界面上会与 Graphene 和  $Ti_2CF_2$  形成 p 型肖特基接触，与  $Ti_3C_2O_2$  和  $V_2CF_2$  会形成 p 型欧姆接触。由于 ML GeAs 出色的各项异性，在水平界面上，研究了 ML GeAs 两个方向上的输运性质。在沿 x 和 y 方向上，MLGeAs 与  $Ti_3C_2O_2$ , Graphene 和  $Ti_2CF_2$  形成 p 型肖特基接触，肖特基势垒分别为 0.15(0.38), 0.15(0.11) 和 0.29 (0.21) eV，与 Cu 形成 n 型肖特基接触其值为 0.64 (0.65) eV，而与  $V_2CF_2$  接触时形成 p 型准欧姆接触。研究的结构不仅将增进我们对 ML GeAs 与金属界面的理解，而且还将有助于 ML GeAs 晶体管的设计。

**墙报题目：“On-off-on” Fluorescence Switch of Graphene  
Quantum Dots: A Cationic Control Strategy**

**作者：王中腾 徐晶\***

浙江农林大学 854169849@qq.com

**摘要：**

基于石墨烯量子点的荧光开关因其良好的应用前景，在环境、医学和数据安全等领域备受关注。然而，由于有效的荧光恢复策略有限，已知的 GQDs 三元“开-关-开”荧光开关非常少。在这项工作中，我们提出了一种新的阳离子控制策略，并设计了一种新的“开-关-开”荧光开关，即 GQDs-Cu<sup>2+</sup>/Fe<sup>3+</sup>/Cr<sup>3+</sup>-Al<sup>3+</sup>/Ga<sup>3+</sup>/In<sup>3+</sup>，其中合成的 GQDs 的荧光被 Fe<sup>3+</sup>、Cu<sup>2+</sup>和 Cr<sup>3+</sup>猝灭，随后被三种 IIIA 离子 Al<sup>3+</sup>、Ga<sup>3+</sup>和 In<sup>3+</sup>恢复。与原始量子点相比，相应的回收率可达 0.81。结合量子化学计算和 XPS 结果表明，阳离子引起的 $\pi$ 共轭区的变化决定了荧光的猝灭和恢复。在此基础上，提出了一种用于信息加密的防伪隐形油墨。本工作首次报道了 IIIA 离子 Al<sup>3+</sup>、Ga<sup>3+</sup>和 In<sup>3+</sup>可用于荧光恢复，本文提出的阳离子控制策略为今后研究开发“开-关-开”荧光开关提供了一种新的有前途的策略。

墙报题目：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

作者：杨点 韩楠楠\*

西北工业大学 *1468380840@qq.com*

摘要：

Metal doped black phosphorene (BP) has been proven to have many unique properties and bright prospects in many applications, such as sensing and catalysis. However, there are few studies on metal doped BP with two P atoms substituted by one metal atom (M-2P). In this work, we investigated the stability of both M-1P and M-2P configurations (M=Au, Ag, Cu, Pt, Pd, Ni, Ir, Rh and Co). Our key finding is that for Au, Ag and Pt, the M-2P configurations are more stable than corresponding M-1P ones. Based on this, our simulation further reveals that Au-2P and Ag-2P are promising materials for NO sensing and catalysis for hydrogen evolution reactions (HER). Our work provides insightful guidance for the sensing and catalysis applications of metal doped BP.

**墙报题目: Accurate Electronic Properties and Nonlinear Optical  
Response of Two-dimensional MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub>**

**作者: 杨佳姝 高峻峰\***

大连理工大学 [yangjiashu@mail.dlut.edu.cn](mailto:yangjiashu@mail.dlut.edu.cn)

**摘要:**

Two-dimensional MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub> (M = Mo, W, V, Nb, Ta, Ti, Zr, Hf, or Cr; A = Si or Ge; Z = N, P, or As) is a new lead in the 2D family, because it exhibits versatile properties by tuning the components M, A and Z. However, the theoretical studies on MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub> are quite limited, and electronic properties are mainly studied by standard DFT levels, which seriously underestimates the band gap. Here, we systematically investigated the electronic properties and nonlinear optical response of MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub> using a hybrid HSE06 functional. It was found that replacing component Z changes the lattice constant most, while the lattice influence by component M substitution is only slight. We showed that the gap difference between PBE and HSE06 is generally about 30% but can be up to 101%. (M<sup>IV</sup> = Hf, Ti, Zr)Si<sub>2</sub>N<sub>4</sub> possesses multi-valley characteristics. Furthermore, the second-harmonic generation (SHG) response of various MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub> composites were also calculated. Three non-zero elements of second order non-linear susceptibilities are revealed for MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub> with the relation:  $d_{16}=d_{21}=d_{22}$ , indicating that MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub> belongs to the D<sub>3H</sub><sup>1</sup> space group. HfSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> possesses a multi-valley characteristic, and exhibits the largest susceptibility under broad wavelengths and the value of  $d_{21}$  reaches 3697.04 pm V<sup>-1</sup> at band gap resonance energy. Intriguingly, the non-linear coefficients of MoSi<sub>2</sub>P<sub>4</sub> and MoSi<sub>2</sub>As<sub>4</sub> in the IR region are two orders of magnitude larger than those of other well-known non-linear crystals, such as LiGaS<sub>2</sub> and BaAl<sub>4</sub>S<sub>7</sub>. We further explored the anisotropic SHG response by the polar plot of intensity under different incident light into MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub>. Our work provides theoretical guidelines for further experimental explorations of MA<sub>2</sub>Z<sub>4</sub> and paves the way for its utilizations in non-linear optic devices.

**墙报题目: Ultra-high piezoelectric coefficients and  
strain-sensitive Curie temperature in hydrogen-bonded  
ferroelectrics**

**作者: 任洋洋 吴梦昊\***

华中科技大学 *D201880073@hust.edu.cn*

**摘要:**

We propose a new approach to obtain ultra-high piezoelectric coefficients that can be infinitely large theoretically, where ferroelectrics with strain-sensitive Curie temperature are necessary. We show the first-principles plus Monte Carlo simulation evidence that many hydrogen-bonded ferroelectrics (e.g. organic PhMDA) can be ideal candidates, which are also flexible and lead-free. Owing to the specific features of hydrogen bonding, their proton hopping barrier will drastically increase with prolonged proton transfer distance, while their hydrogen-bonded network can be easily compressed or stretched due to softness of hydrogen bonds. Their barriers as well as the Curie temperature can be approximately doubled upon a tensile strain as low as 2%. Their Curie temperature can be tuned exactly to room temperature by fixing a strain in one direction, and in another direction, an unprecedented ultra-high piezoelectric coefficient of 2058 pC/N can be obtained. This value is even underestimated and can be greatly enhanced when applying a smaller strain. Aside from sensors, they can also be utilized for converting either mechanical or thermal energies into electrical energies due to high pyroelectric coefficients.

**墙报题目: Bandgap engineering of two-dimensional C<sub>3</sub>N bilayers**

作者: 魏文娅 袁清红\*

华东师范大学 *gqding@mail.sim.ac.cn*

**摘要:**

Carbon materials such as graphene are of potential use in the development of electronic devices because of properties such as high mechanical strength and electrical and thermal conductivity. However, technical challenges, including difficulties in generating and modulating bandgaps, have limited the application of such materials. Here, we show that the bandgaps of bilayers of two-dimensional C<sub>3</sub>N can be engineered by controlling the stacking order or applying an electric field. AA' stacked C<sub>3</sub>N bilayers are found to have a smaller bandgap (0.30 eV) than AB' stacked bilayers (0.89 eV), and both bandgaps are lower than that of monolayer C<sub>3</sub>N (1.23 eV). The larger bandgap reduction observed in AA' stacked bilayers, compared with AB' stacked bilayers, is attributed to the greater p<sub>z</sub> -orbitals overlap. By applying an electric field of ~1.4 V nm<sup>-1</sup>, a bandgap modulation of around 0.6 eV can be achieved in the AB' structure. We also show that the C<sub>3</sub>N bilayers can offer controllable on/off ratios, high carrier mobilities and photoelectric detection capabilities.



**墙报题目： A Family of Ionic Supersalts with Covalent-like  
Directionality and Unconventional Multiferroicity**

**作者：高亚鑫 吴梦昊\***

华中科技大学 [m201770145@hust.edu.cn](mailto:m201770145@hust.edu.cn)

**摘要：**

Ionic crystals composed of elemental ions such as NaCl are non-polar due to directionless ionic bonding interactions. Here, we show that these can develop polarity by changing their building blocks from elemental ions to superalkali and superhalogen cluster-ions, which mimic the chemistry of alkali and halogen atoms, respectively. Due to the non-spherical geometries of these cluster ions, corresponding supersalts form anisotropic polar structures with ionic bonding, yet covalent-like directionality, akin to  $sp^3$  hybridized systems. Using density functional theory and extensive structure searches, we predict a series of stable ferroelectric/ferroelastic supersalts,  $PnH_4MX_4$  ( $Pn = N, P$ ;  $M = B, Al, Fe$ ;  $X = Cl, Br$ ) composed of superalkali  $PnH_4$  and superhalogen  $MX_4$  ions. Unlike traditional ferroelectric/ferroelastic materials, the cluster-ion based supersalts possess ultra-low switching barrier and endure large ion displacements and reversible strain. In particular,  $PH_4FeBr_4$  exhibits riferroic coupling of ferroelectricity, ferroelasticity, and antiferromagnetism with controllable pin directions via either ferroelastic or 90-degree ferroelectric switching.

**墙报题目: Rational design of 2D organic magnets with giant magnetic anisotropy based on two-coordinate 5d transition metals**

**作者: 邢健沛 蒋雪\***

大连理工大学 [xingjianpei@mail.dlut.edu.cn](mailto:xingjianpei@mail.dlut.edu.cn)

**摘要:**

As a new class of single-molecule magnets, two-coordinate complexes of open-shell transition metals are comparatively rare and have attracted interest due to their high degree of coordinative unsaturation. However, the dynamic distortion associated with the low coordination number of the metal center hinders the applications of high-density information storage, quantum computing and spintronics. Here, we propose a series of stable 2D metal organic frameworks (MOFs) constructed by ideal (1, 3, 5)-benzenetricarbonitrile (TCB) molecules and 5d transition metals (Hf, Ta, W, Re, Os, and Ir) with highly symmetrical ligand field and rigid - conjugated framework. Among them, TCB-Re exhibits intrinsic ferromagnetic ordering with considerably large magnetic anisotropic energy (MAE) of 19 meV/atom and high Curie temperature (TC) of 613 K. Under biaxial strain, diverse magnetic states (such as ferromagnetic, paramagnetic, and antiferromagnetic state) can be achieved in TCB-Re by the complicated competition between the in-plane d-px/y-d and out-of-plane d-pz-d superexchange interactions. At a small compressive strain of 0.5%, the MAE for perpendicular magnetization increases substantially to 120 meV/atom, meanwhile the magnetization and TC above room temperature are well retained. Our results not only extend two-coordinate transition metal complexes to continuous 2D organic magnets, but also demonstrate an effective method of strain engineering for manipulating the spin state and MAE.

## 墙报题目：单层 $\alpha$ 相正交褶皱结构普适的管状边界

作者：张艳雪 高峻峰\*

大连理工大学 *star\_2018@mail.dlut.edu.cn*

### 摘要：

有限尺寸的二维器件不可避免的产生边界。通常，扶手椅形边界是稳定的，而锯齿形边界是不稳定的，倾向于发生重构。例如，对于单层蜂窝状结构，如石墨烯和氮化硼，锯齿形边界倾向于重构形成  $zz(57)$  边界。对于单层三明治结构的过渡金属二硫化物，锯齿形边界倾向于形成  $(2\times 1)$  和  $(3\times 1)$  重构。对于单层正交褶皱结构的磷烯，锯齿形边界倾向于重构形成管状边界。管状边界不仅提高了体系的稳定性，还导致金属到半导体转变，而且改变了体系的振动模式，进而改变了热导率。然而，这种独特的管状边界是否普遍的存在于单层  $\alpha$  相正交褶皱结构是不清楚的。

因此，本文研究了单层  $\alpha$  相的第五主族的砷烯和第四主族的金属硫族化合物(硫化锗，硒化锗，硫化锡，硒化锡)的锯齿形边界重构，利用第一性原理计算和 CALYPSO 软件。对于由单一元素构成的砷烯，管状边界是最稳定的边界。然而，对于由双元素构成的第四主族的金属硫族化合物，我们预测了两种边界类型。沿着金属边界，管状边界是最稳定的边界。而沿着非金属边界，只倾向发生轻微的  $(2\times 1)$  边界重构。以单层硫化锗为例，我们揭示了边界重构的势垒仅为 0.016 eV 和 0.411 eV 对硫边界和锗边界。进一步的，分子动力学模拟和相图表明，我们预测的管状边界在室温、真空和低氢分压条件下是容易形成的并能稳定的存在。最后，锯齿形边界重构引发 VBM 和 CBM 电荷空间分离。TDDFT 模拟表明电荷分离时间为 672 fs，而寿命超过 5 ns，使得空间电荷可以有效的被积累，这对光电和催化是至关重要的。

**墙报题目: Layer-dependent magnetic phase diagram in  $\text{Fe}_n\text{GeTe}_2$  ( $3 \leq n \leq 7$ ) ultrathin films: coexistence of localized and itinerant electronic states of Fe with variable valence**

作者: 刘芹茜 蒋雪\*

大连理工大学 [liuqinxi@mail.dlut.edu.cn](mailto:liuqinxi@mail.dlut.edu.cn)

**摘要:**

Two-dimensional (2D) ferromagnets with high Curie temperature (TC) are highly desirable due to their potential applications in spintronic devices. However, they are rarely obtained in experiments mainly due to the challenge of synthesizing high-quality 2D crystals, and their TC values are below the room temperature. By first-principles calculations, herein we design a family of stable 2D  $\text{Fe}_n\text{GeTe}_2$  ( $4 \leq n \leq 7$ ) ultrathin films that are similar to the reported  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ , which exhibit coexistence of itinerant and localized magnetism. The coexistence of itinerant and localized magnetism could distinguished by their  $a_1$  and  $e_1/e_2$  electrons. Among them, 2D  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  and  $\text{Fe}_4\text{GeTe}_2$  are ferromagnetic metals with TC of 138 K and 68 K, respectively; 2D  $\text{Fe}_5\text{GeTe}_2$ ,  $\text{Fe}_6\text{GeTe}_2$  and  $\text{Fe}_7\text{GeTe}_2$  ultrathin films are Néel's P-types, R-type, R-type ferrimagnetic metals with TC of 320 K, 450 K and 570 K, respectively. The thickness induced magnetic phase transition is mainly originated from the competition between itinerant and localized states, which correlate well with the content of  $\text{Fe}^{3+}$  and  $\text{Fe}^{2+}$  ions. We further propose a mechanism that combined localized magnetic exchange in  $a_1$  spins and itinerant electrons coupling in  $e_1/e_2$  states to clarify such interesting thickness effect. Our results not only propose a universal mechanism to understand the magnetic coupling in  $\text{Fe}_n\text{GeTe}_2$  systems with the coexistence of localized and itinerant magnetism, but also endow 2D ultrathin films as promising candidates for spintronics at room temperature.

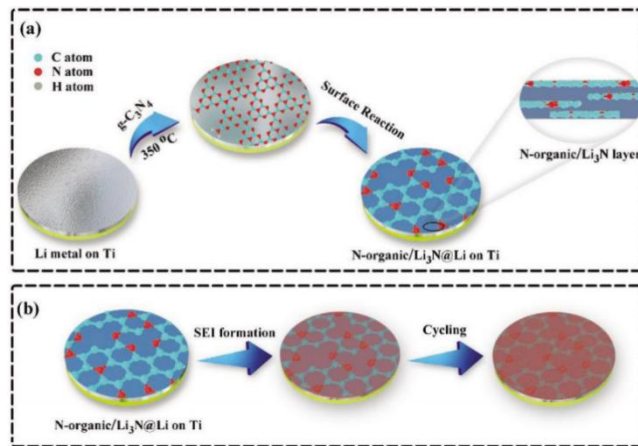
**墙报题目: g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Derivative Artificial Organic/Inorganic  
Composite Solid Electrolyte Interphase Layer for Stable  
Lithium Metal Anode**

**作者: 王立锋 武晓君\***

中国科学技术大学 *wlifeng@mail.ustc.edu.cn*

**摘要:**

Lithium metal anodes are one of the most promising anodes in “next-generation” rechargeable batteries. However, continuous dendrite growth and interface instability of the anode have prevented practical applications. Constructing an artificial solid electrolyte interphase (SEI) is an effective way to solve these issues. Herein, an artificial organic/inorganic SEI layer (denoted as N-organic/Li<sub>3</sub>N) is designed, consisting of Li<sub>2</sub>CN<sub>2</sub> and Li<sub>3</sub>N phases, to achieve stable cycling of Li metal electrodes. Density functional theory (DFT) results reveal that the N-organic/Li<sub>3</sub>N layer with a high Li ionic conductivity can effectively facilitate the transport of Li ions across the electrode surface and lead to uniform Li ionic flux on Li electrodes via strong interactions between Li ions and N-organic groups, resulting in dendrite-free Li stripping/plating. The N-organic/Li<sub>3</sub>N-coated Li (denoted as N-organic/Li<sub>3</sub>N@Li) anode delivers stable long-term cycling performance over 1100 h with a fixed areal capacity of 2 mAh cm<sup>-2</sup> under 1 mA cm<sup>-2</sup>. A full battery assembled with a LiNi<sub>0.6</sub>Co<sub>0.2</sub>Mn<sub>0.2</sub>O<sub>2</sub> (NCM622) cathode displays better long-term cycle performance when the N-organic/LiN@Li composite anode is applied. The advantages of the organic/inorganic artificial SEI provide important insights into the design principles of SEI for lithium metal anodes.



第十三届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会 P042

**墙报题目： Two-dimensional Multiferroic FeCl with Room Temperature Ferromagnetism and Tunable Magnetic Anisotropy via Ferroelectricity**

**作者： 孙英杰 吕海峰\***

河北科技大学 770194575@qq.com

**摘要：**

Achieving multiferroic two-dimensional (2D) materials with electric field control of magnetism is highly pursuit in nanospintronics but rare, as the mutual exclusive origins of magnetism and ferroelectricity. Based on first-principles calculations, a multiferroic metal monohalide FeCl monolayer is identified with Fe atoms patterned in a rectangular lattice. The strong direct exchange coupling renders a high Curie temperature of 1130 K and large MAE of 1.95 meV per Fe atom, remarkably higher than those of  $CrI_3$  monolayer. Particularly, the parallel alignment of spin order and electric polarization vector render the tunable magnetic anisotropy via ferroelectricity, leading to intrinsic magnetoelectric coupling. Based on the results of phonon spectrum and Born-Oppenheimer molecular dynamic simulation, the stability of FeCl monolayer is confirmed. Our results should shed light on a new branch of 2D materials in the pursuit of magnetoelectric multiferroic for applications in nanospintronics.



**墙报题目： N-heterocyclic carbene in low-dimensional carbon  
allotropes: from carbon nitride to NRR catalyst**

**作者：刘思彤 徐晶\***

浙江农林大学 *15566530731@163.com*

**摘要：**

N-heterocycle carbene (NHCs), a class of organic compounds of enormous practical significance, possesses high reactivity originated from the incomplete electron octet and coordinative unsaturation and is easy to dimerize to olefins. Therefore, tremendous efforts have always been devoted to find effective means to stabilize NHC. In this work, considering that aromaticity can improve the stability of NHC, we propose for the first time that low-dimensional carbon materials could act as ideal platforms to stabilize NHC. By constructing five-membered ring NHCs in the structures of zero-dimensional (0D) fullerene, one-dimensional (1D) carbon nanotube and two-dimensional (2D) graphene, a series of low-dimensional NHC carbon nitrides are obtained. First-principles calculations show that these NHC carbon nitrides are both thermally and dynamically stable, and they exhibit various electronic properties ranging from metallic to semiconducting, with some of them possessing Dirac cones in their band structures. Furthermore, the characteristics of NHC are well preserved. After adsorbing Fe atoms, one 2D NHC carbon nitride exhibits excellent performance of catalyzing the reduction of nitrogen. Thus, we expect that our findings will trigger a new wave of researches and applications of both NHC and low-dimensional carbon materials.

**墙报题目: IrW nanochannel support enabling ultrastable electrocatalytic oxygen evolution at  $2 \text{ A cm}^{-2}$  in acidic media**

**作者: 王海云 武晓君\***

中国科学技术大学 [1936343364@qq.com](mailto:1936343364@qq.com)

**摘要:**

A grand challenge for proton exchange membrane electrolyzers is the rational design of oxygen evolution reaction electrocatalysts to balance activity and stability. Here, we report a support-stabilized catalyst, the activated  $\sim 200$  nm-depth IrW nanochannel that achieves the current density of  $2 \text{ A cm}^{-2}$  at an overpotential of only  $\sim 497$  mV and maintains ultrastable gas evolution at  $100 \text{ mA cm}^{-2}$  at least 800 h with a negligible degradation rate of  $\sim 4 \mu\text{V h}^{-1}$ . Structure analyses combined with theoretical calculations indicate that the IrW support alters the charge distribution of surface  $(\text{IrO}_2)_n$  clusters and effectively confines the cluster size within 4 ( $n \leq 4$ ). Such support-stabilizing effect prevents the surface Ir from agglomeration and retains a thin layer of electrocatalytically active  $\text{IrO}_2$  clusters on surface, realizing a win-win strategy for ultrahigh OER activity and stability. This work would open up an opportunity for engineering suitable catalysts for robust proton exchange membrane-based electrolyzers.

**墙报题目: Expanded Porphyrin Nanosheet for Metal-free  
Photocatalytic Water Splitting Using Visible Light**

**作者: 李秀玲\***

南京师范大学 *xlli@njnu.edu.cn*

**摘要:**

Photocatalytic water splitting to generate hydrogen gas is an ideal solution for environmental pollution and unsustainable energy issues. In the past few decades, many efforts have been made to increase the efficiency of hydrogen production. One of the most important ways is to achieve light absorption in the visible range to improve the conversion efficiency of solar energy into chemical energy, but it still presents great challenges. We here predicted a novel organic film, which can be obtained by polymerizing HTAP molecules, as an ideal material for photocatalytic water splitting. Basing on first-principles calculations and Born-Oppenheimer quantum molecular dynamic simulations, the metal-free two-dimensional nanomaterial has proven to be structurally stable, with a direct band gap of 2.12 eV, which satisfies the requirement of light absorption in the visible range. More importantly, the conduction bands and valence bands completely engulf the redox potentials of water, making the such film a promising photocatalyst for water splitting. This construction method through the topological periodicity of organic molecules provides a design scheme for the photocatalyst for water splitting.

**墙报题目：第 IV 族类蓝磷相单硫化物本征压电性的理论研究**

**作者：戴玉鑫 黄玉成\***

安徽师范大学 [daiyx@ahnu.edu.cn](mailto:daiyx@ahnu.edu.cn)

**摘要：**

在已知的 $\beta$ -GeTe 体相和衍生的单层结构基础上，我们通过替代方法提出了一系列具有本征内置电场的结构类似物 MX (M=Ge, Sn; X=S, Se, Te)。利用第一性原理计算，我们证明了这些 MX 单层和体相在热力学、动力学和力学上是稳定的，且体相的稳定性较之单层更高。电子结构计算表明，单层的带隙较大（从 2.38 到 3.27 eV），而体相的带隙较小（从 0.06 到 0.78 eV）。计算出的 MX 单层的压电系数  $d_{11}$  在 6.6 至 10.9 pm/V 之间，MX 体相的  $d_{33}$  高达 40.3-213.7 pm/V。通过将原子极化率、原子质量、相对离子运动、Bader 电荷和晶格参数相关联，我们提出了一个经验模型来预测 2D MXs 的压电系数，且模型预测的结果与 DFT 计算的结果匹配地较好。MXs 的多样电子结构和压电性能以及揭示的潜在机制为寻找新的压电材料提供了指导。

## 墙报题目：Cu/TiO<sub>2</sub> 单原子水分解催化剂的活性起源

作者：程成 龙闰\*

北京师范大学 15565793032@163.com

### 摘要：

金属氧化物是一类研究较为广泛的光催化材料，具有优异的光催化活性，但是其水分解的效率仍然远低于理论值。其主要原因是氧空位等缺陷会在氧化物中形成小极化子，作为载流子复合中心，严重限制载流子的利用。实验上往往通过掺杂等手段提高载流子分离，进而提高水分解的效率。利用含时密度泛函理论结合非绝热动力学模拟，我们解释了具备优异水分解性能的单原子 Cu 掺杂 TiO<sub>2</sub> (Cu/TiO<sub>2</sub>) 催化剂的活性机理。初始状态 Cu/TiO<sub>2</sub> 样品呈白色没有活性，原因是 Cu 掺杂引起的致命性的浅能级杂质态加快电子-空穴复合，限制了载流子的利用。而光照后样品变为黑色，表现出持久的析氢活性的原因是辐射引起电子转移和质子化后(H<sub>ads</sub>\_Cu/TiO<sub>2</sub>)，晶格进一步畸变稳定深能级 Cu *d* 轨道，潜能级杂质态被拖到价带，从而延长载流子寿命约一个量级，进而提高光催化析出氢气的活性。我们的计算结果表明载流子的主要损失发生在自旋向下的频道，利用现有的控制自旋实验技术，只利用自旋向上的载流子，进而不需要质子与电子耦合就可以实现较长的载流子寿命。我们的结果解释了 Cu/TiO<sub>2</sub> 活性表现的机理，加深了对光催化系统激发态动力学的理解，并且提出了操控自旋选择提高光催化析氢效率的见解。

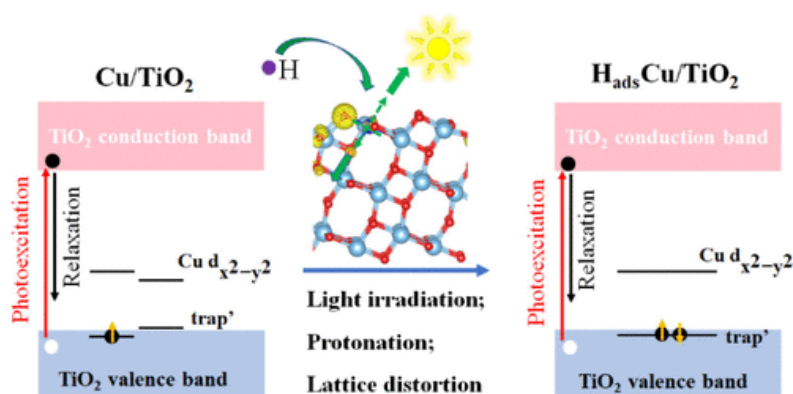


Fig. 1 The photoactivation mechanism of Cu/TiO<sub>2</sub> single atom catalyst. In the initial state, Cu/TiO<sub>2</sub> is inactive because of the detrimental shallow trap in the spin-down channel; after light irradiation, electron transfer and protonation, the shallow trap is eliminated and the local distortion around the Cu atom stabilizes the deep trap state on the Cu atom, giving rise to high HER activity. We also propose that the water splitting performance can be enhanced by spin selection.

## 墙报题目：钙钛矿铁弹畴壁光生载流子动力学的理论计算

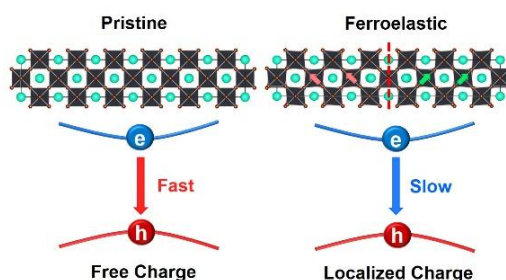
作者：史然 龙闰\*

北京师范大学 201821150069@mail.bnu.edu.cn

### 摘要：

自 2009 年有机-无机钙钛矿电池在实验室被制备出来后，其（混合 A 位阳离子）光电转换效率由最初的 3.8% 攀升至 2019 年的 25.2%。但是，该材料及其器件在光、湿、热等条件下急剧退化，严重制约了其商业化应用。得益于较好的环境稳定性和优异的光电性能，Cs 基全无机卤化钙钛矿太阳能电池应运而生，效率已超过 18%，比杂化钙钛矿太阳能电池的最高效率仍然低七个百分点左右。这是因为较快的非辐射电子-空穴复合加速了电荷和能量损失，限制了转换效率的进一步提升。为了优化器件性能，必须降低电荷复合率，提高光生载流子量子产率和光电流。具有周期性晶体结构的钙钛矿在受到外部电场、磁场或应力作用时，会在晶体内部自发产生有序的局部微观形变，形成畴结构，进而影响钙钛矿的光电性能。例如，实验报导远端外延方法可以在钙钛矿  $\text{CsPbBr}_3$  中形成铁弹畴，畴结构的形成增强了光致发光强度，延长了激发态载流子寿命。然而，其微观物理机制尚不明确。

本研究构建了呈镜面对称的八面体反向扭曲的铁弹畴结构，采用含时密度泛函理论结合非绝热分子动力学模拟，研究了铁弹畴对  $\text{CsPbBr}_3$  钙钛矿电子结构和光生电荷复合动力学的影响。模拟结果表明，临近的铁弹畴自发形成了方向相反的内部内建电场，驱动正负电荷向相反的方向运动，使正负电荷在实空间有效分离，形成了电荷分离态，降低了非绝热耦合强度。同时，由于八面体反向扭曲降低了晶体的对称性，激活了更多的声子振动模式并增强了电声相互作用，加速了量子相干性过程。两者协同作用使铁弹性体系的非辐射电子-空穴复合时间较之完美体系延长了 4.2 倍。本研究促进了对铁弹畴  $\text{CsPbBr}_3$  钙钛矿载流子复合机制在原子层面的理解，为设计高性能全无机卤化物钙钛矿提供了有益参考。





**墙报题目: Topological quadrupole phase in two dimensional C<sub>2</sub>N**

**作者: 李泽厚 孙立忠\***

湘潭大学 *lizhou3914@gmail.com*

**摘要:**

Quadrupole phase, as a novel high-order topological phase, exhibits nontrivial gapless states at the boundary whose dimension is lower than bulk by two. However, this phase has not been observed in two-dimensional (2D) materials up to now. In this work, based on first-principles calculations and tight-binding (TB) method, we propose that the experimentally synthesized C<sub>2</sub>N is a 2D quadrupole topological insulator with one dimensional gapped edge states and zero dimensional gapless corner states. C<sub>2</sub>N is found to have a large bulk gap of 2.45 eV and an edge gap of 0.32 eV, making it an excellent candidate to evidently present the nontrivial corner states in experiments. The robustness of the corner states against the edge disorders has been explicitly identified. Moreover, another three C<sub>2</sub>N-like materials are also found to host the nontrivial quadrupole phase, which include an experimentally synthesized material aza-fused microporous polymers (CMP). Our results provide four material candidates to study the 2D quadrupole topological phase in future experiments.

**墙报题目: The effect of axial O atom on the catalytic mechanism of NiN<sub>4</sub> single-atom catalysts in CO<sub>2</sub>RR: An ab initio molecular dynamics study**

**作者: 胡绪 周震**

南开大学 [2120200942@mail.nankai.edu.cn](mailto:2120200942@mail.nankai.edu.cn)

**摘要:**

Electrochemical CO<sub>2</sub> reduction reaction (CO<sub>2</sub>RR) is a very important approach to realize sustainable development. Single-atom catalysts have the advantages of both homogeneous and heterogeneous catalysts, and considerable progress has been made in optimizing the performance of catalysts by controlling the local coordination environment, especially through out-of-plane methods. In this paper, we used an explicit solvent model combined with the “slow-growth” method and thermodynamic integration to investigate the influence of axial oxygen atom on the graphene-supported NiN<sub>4</sub> moiety catalysts within CO<sub>2</sub>RR. We found that the axial oxygen can promote the activation step of CO<sub>2</sub> significantly. Our results will provide a new perspective for CO<sub>2</sub>RR catalyzed by single-atom catalysts in the realistic electrochemical environment.

## 墙报题目：层状插入金属基材料固氮催化剂的理论设计 及机理研究

作者：党茜 唐绍彬\*

赣南师范大学 460868627@qq.com

### 摘要：

过渡金属 (TM) 单原子催化剂 (single-atom catalysts, SACs) 凭借其独特的高活性、高原子利用率等优势, 在电催化  $N_2$  还原领域具有广阔的应用前景。然而, SAC 过强的极化效应也会对电催化 NRR 带来负面影响。我们采用第一性原理模拟, 首次设计了单 TM 原子夹在氮化硼 (BN) 片和石墨烯层间的三明治结构 (BN/TM/G) 作为高效的 NRR SACs。原创性地提出了, 利用电荷分布局域的 BN 和电荷离域的石墨烯调控单原子催化剂极化场强度的概念, 说明了包夹在 BN 和石墨烯层间的 TM SACs 可实现稳定和可调的极化场。极化促使 TM 原子的电子迁移到 BN 片临近的 B 原子上, 使得 B 成为  $N_2$  俘获和活化的活性位点。应用外场调控的极化有效促进氮分子的吸附和活化。通过考察  $N_2$  转化为氨的整个路径, BN/V/G 和 BN/Ti/G 体系显示了高的催化活性, 且能够抑制 HER。TM SACs 突出的活性主要归于 TM-BN 界面建立的不太强也不太弱的极化电场。该工作不仅为活化惰性 BN 片提供了一个新的策略, 而且为电催化合成氨提供了新的路径。同时, 我们也发现了单 TM 原子夹在二硫化钼 ( $MoS_2$ ) 和石墨烯层间的三明治结构 ( $MoS_2$ /TM/G) 也可以作为高效的固氮催化剂, 具有较好的催化性能。构建层状材料插入金属基固氮催化剂可以提高金属原子的稳定性和调控材料表面的电子结构, 为单原子催化剂的设计提供了一种新的策略。

## 墙报题目：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的协同效应

作者：刘天涌 唐绍彬\*

赣南师范大学 2206602718@qq.com

### 摘要：

在环境条件下进行人工固氮对于农业和清洁能源领域具有重要意义。过渡金属 (TM) 单原子催化剂 (single-atom catalysts, SACs) 凭借其独特的高活性、高原子利用率等优势，在电催化  $N_2$  还原领域具有广阔的应用前景。调控单原子中心的局部环境至关重要，但是保持挑战。利用第一性原理计算，我们研究了在缺陷的硼碳氮纳米管(BCNT)上嵌入过渡金属(TM)原子作为氮还原反应(NRR)电催化剂。结果表明，过渡金属原子锚定在硼空位缺陷上具有很好的动力学和热力学稳定性。氮化硼(BN)和碳区域的协同效应调控了单原子中心的电荷极化和材料的电子性质，因此促进  $N_2$  吸附、活化和随后的还原。重要地，大直径的缺陷硼碳氮纳米管支持的单钼(Mo)原子具有优异的 NRR 活性，且能有效抑制析氢反应。这项工作作为设计室温下碳基单原子固氮催化剂提供了新的可能途径。

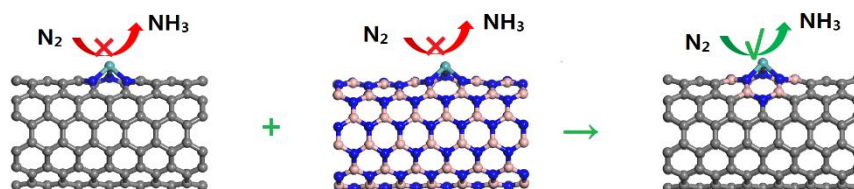


图 1. 三种纳米管负载的单原子催化 NRR 示意图

**墙报题目: Crown ethers in hydrogenated graphene**

**作者: 郭凯 徐晶\***

浙江农林大学 *1798592862@qq.com*

**摘要:**

Crown ethers could serve as hosts to selectively incorporate various guest atoms or molecules within the macrocycles. However, the high flexibility of crown ether molecules limits their applications in areas requiring higher binding strength and selectivity. As an important graphene derivate, graphane, which is composed of entirely  $sp^3$  hybridized carbon atoms and possesses the characteristic of non-wrinkle in contrast to graphene, provides an ideal two-dimensional platform to rigidify crown ether molecules. In this work, using first principles calculations, we demonstrate that the embedment of various crown ethers with different cavity sizes in the graphane lattice are thermodynamically and kinetically stable. Compared with the corresponding crown ether molecules and crown ether embedded graphenes, the binding affinity and selectivity for alkali metal cations are greatly improved, which may provide a good means in the field of alkali metal cations separation. Therefore, considering the easy synthesis and tunable crystal structures of graphane, we expect that our findings will trigger a new wave of researches and applications of both crown ethers and graphane.

## 墙报题目：锂空电池正极材料以及分子添加剂的 DFT 理论研究

作者：袁汝明\*

厦门大学 [yuanrm@xmu.edu.cn](mailto:yuanrm@xmu.edu.cn)

### 摘要：

基于多电子转化反应的锂空电池，由于其超高的理论比能量(3500 Wh·kg<sup>-1</sup>)，成为二次电池领域的热点研究方向。但由于锂空电池充放电过程的动力学较为缓慢，同时放电产物 LiO<sub>2</sub> 存在严重的副反应问题限制了锂空电池的进一步发展。在此，我们采用密度泛函计算并结合实验，系统研究了不同正极材料如□-MnO<sub>2</sub>/RuO<sub>2</sub> 和开放式结构的剑麻状 Co<sub>9</sub>S<sub>8</sub> 材料具有较好充放电性能的可能原因，同时对于溶液相添加剂如钌联吡啶配合物催化剂(RuPC)和小分子 PhIO 添加剂抑制副反应，促进溶液相反应过程进行了系统的 DFT 研究；从而为高比能量锂空电池体系的理性设计提供理论支撑。

通过构建放电产物(Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)<sub>8</sub> 簇并考察该小簇在气相以及 RuO<sub>2</sub> 表面的分解过程，发现 RuO<sub>2</sub>(110)表面有利于放电产物 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 解离成非计量的 Li<sub>2-x</sub>O<sub>2</sub> 和 Li<sup>+</sup>，同时解离出的 Li<sup>+</sup>则可扩散至□-MnO<sub>2</sub> 表面或晶格孔道中得到进一步的稳定，从而使得充电过程能有效进行。对于具有开放式结构的剑麻状 Co<sub>9</sub>S<sub>8</sub> 材料与 CoO 相比具有更好性能的原因在于，Co<sub>9</sub>S<sub>8</sub> 有着更强的 O<sub>2</sub> 亲合性，可以诱导氧气在其纳米棒上进行电化学反应，使 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 在放电过程中以异相成核的方式生长，形成较好的 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/Co<sub>9</sub>S<sub>8</sub> 接触界面。

设计和合成出的一种可溶性钌联吡啶配合物催化剂(RuPC)。计算表明，在放电过程中，RuPC 中的 Ru 金属中心可以与 LiO<sub>2</sub> 相互作用，形成相对稳定、反应活性较低的中间产物 (RuPC(LiO<sub>2</sub>-3DMSO))，从而抑制 LiO<sub>2</sub> 副反应的产生，同时促进溶液相反应过程，提升放电容量。对于在 Li-O<sub>2</sub> 电池体系中加入 PhIO 能很好提高电池 OER 性能的原因在于，PhIO 在结构上具有极化的 I<sup>3+</sup>=O<sup>2-</sup>基团，能有效地稳定锂氧物种。根据 DFT 理论预测，LiO<sub>2</sub> 能与三分子的 PhIO 配位，其结合自由能为-8.4 kcal/mol，比 LiO<sub>2</sub> 与三分子的 DMSO 配位要低 4.5 kcal/mol，从而能有效地抑制 LiO<sub>2</sub> 副反应的发生。进一步的计算发现，PhIO 也能很好地稳定 Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 物种，使得(LiO<sub>2</sub>)<sub>2</sub> 在液相中的歧化过程能顺利进行，其歧化能垒仅为 16.6 kcal/mol，比在 DMSO 中的歧化垒低 3.7 kcal/mol。



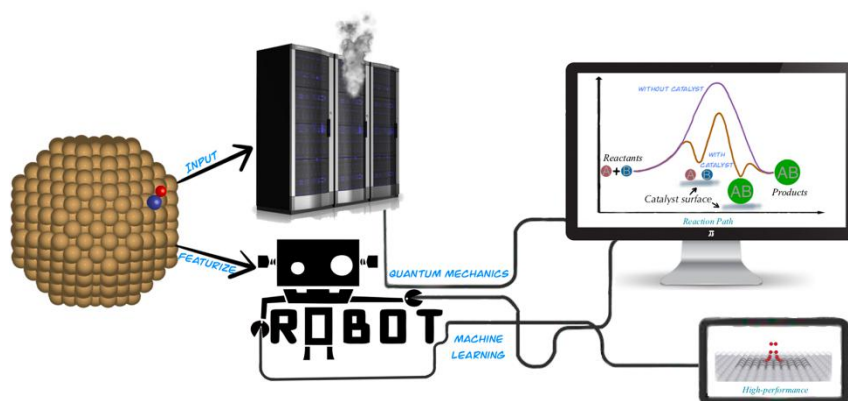
## 墙报题目：机器学习局域力场与吸附势辅助筛选析氢反应合金催化剂

作者：陈乐添 周震\*

南开大学 1613538@mail.nankai.edu.cn

### 摘要：

氢能被认为是化石燃料的替代品之一，析氢反应是电解水制取氢气和氧气过程的一部分，尽管电解水技术已经十分成熟，然而高的析氢反应过电位限制了其大规模的应用。其次，目前工业上的主要使用贵金属（铂族金属）作为催化剂，制约了其推广，因此，寻找高效，经济，环境友好的析氢催化剂成为了关键。随着人工智能技术在材料研发上的应用，使得大规模高通量筛选催化剂成为了可能。高通量筛选催化剂时，往往以中间产物的吸附能为筛选条件，以预测高效催化剂。目前大多数工作都是基于获取初始模型的指纹特征作为机器学习的输入以预测吸附能。由于初始结构获取的指纹特征不如终态结构获取的指纹特征准确，因此机器学习模型的精度较之以终态指纹特征的机器学习模型差。然而，终态结构的获取需要DFT计算，限制了机器学习模型的优势。在本工作中，我们发展了一种图神经网络(CGCNN)，增加了边信息交互，以使其能拟合力场。基于图神经网络，我们构建了机器学习计算器优化结构，以获取终态结构，从而使训练的机器学习模型更加准确。



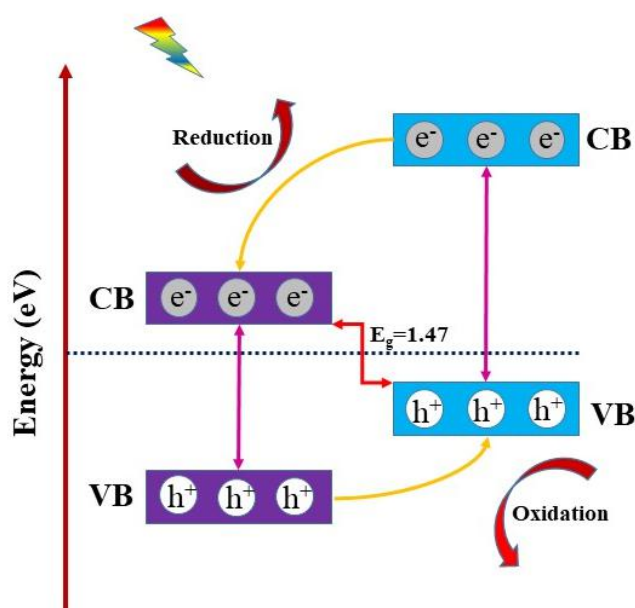
墙报题目: **Electronic and photocatalytic performance of boron phosphide-blue phosphorene vdW heterostructures**

作者: 夏海 周震\*

南开大学 [zindagig236@yahoo.com](mailto:zindagig236@yahoo.com)

摘要:

Hydrogen generation via photocatalytic water splitting is considered as a source of clean energy and an alternative approach to deal with the energy crises and environmental problems. By using first-principles computations, we determine that boron phosphide-blue phosphorene heterostructure is a potential candidates for overall water splitting at low pH values (0~3). It is a semiconductor with a direct band gap of 1.47 eV and possesses type-II band alignment. More importantly, this heterostructure contents the water reduction and oxidation levels for water splitting, with enhanced optical properties in infrared, visible and ultraviolet zones. Particularly, tensile strain can enhance the optical absorption in the visible range and increase the solar energy conversion efficiency. Our study widens the application of boron phosphide-blue phosphorene vdW heterostructures, and could help design more heterostructured photocatalysts.



**墙报题目: Magnetic field modulated photoelectric devices in  
ferromagnetic semiconductor CrXh (X = S/Se, h = Cl/Br/I) van  
der Waals heterojunctions**

**作者: 高寅露 赵纪军\***

大连理工大学 [gaoyinlu@mail.dlut.edu.cn](mailto:gaoyinlu@mail.dlut.edu.cn)

**摘要:**

The interactive control between electron charge and spin is essential to spintronics. Two-dimensional (2D) ferromagnetic semiconductors (FMSs) is a kind of unique candidate materials that could lead to flexible magnetoelectric and magneto-optic applications. In this letter, we construct a series of van der Waals heterostructures by 2D magnetic CrXh (X = S/Se, h = Cl/Br/I) monolayers. Based on first-principles calculations, both monolayers and heterostructures have been demonstrated as intrinsic FMS with large magnetic moments, suitable bandgaps, good carrier mobility and high Curie temperatures. Taking advantage of the heterojunction effect, one can precisely control the charge transport behavior by forming three types of band alignments. Under external alternating magnetic field, CrSeBr/CrSeCl and CrSBr/CrSI heterostructures can reversibly reconfigure between type-II and type-I band alignments upon switching of the spin direction. Combining the robust magnetic ordering and distinctive spin-polarized band alignment, our designed CrXh based magnetic heterostructures are ideal candidates for innovative magnetic-field-modulated photoelectric devices for realizing ultrarapid and reversible “write-read” processes.

## 墙报题目：实际材料 $C_3N$ 中的高阶拓扑声子研究

作者：黄芬芬 马曾胜\*

湘潭大学 [ffh@smail.xtu.edu.cn](mailto:ffh@smail.xtu.edu.cn)

### 摘要：

在拓扑领域中，相比于研究热点对拓扑电子和高阶拓扑电子的研究、新兴的在光子晶体和声子晶体中对高阶拓扑声子的研究，在实际材料中关于高阶拓扑声子的研究非常少。在本工作中，我们发现已成功制备的二维材料  $C_3N$  中具有高阶拓扑声子。为了方便研究这种材料中的高阶拓扑声子，我们构建了一个紧束缚模型来模拟这个二维材料  $p_z$  态的振动。我们发现，这个模型得到的  $p_z$  态的振动模式和第一性原理计算得到的振动模式非常类似。通过这个模型，我们计算了高阶拓扑指数，发现其高阶拓扑指数是拓扑非平凡的。为了进一步研究此材料中的高阶拓扑声子，我们将原来的二维材料切成了一个正六边形，这个正六边形具有扶手型边界，在角上有由两个氮原子和四个碳原子组成的环。通过对其声子色散和波函数的分析，我们发现在其  $p_z$  态声子色散谱的三个不同的带隙中出现了三组不同的角态。我们的研究证明，实际材料中也可以具有高阶拓扑声子。我们的工作为研究高阶拓扑声子提供了新的思路，并为实验研究提供了理论支持。

墙报题目：水在钒团簇上析氢反应机理

作者：张含宇 骆智训\*

中国科学院化学研究所 [zhanghanyu@iccas.ac.cn](mailto:zhanghanyu@iccas.ac.cn)

摘要：

析氢反应(HER)是可再生能源能源的存储和转化系统的核心，水及其与金属的相互作用与人类生命密切相关，而金属团簇与水的反应性对理解氢的生成具有重要意义。在室温下，单个水分子能够与气相中的中性和阳离子钒团簇  $V^{n+/0}$  ( $3 \leq n \leq 30$ ) 发生显著的析氢反应(HER)。实验和理论研究表明，V-OH基团的摆动使钒团簇容易形成V-O-V中间态，进而以一种钓鱼模式(Fishing Mode)使末端氢与吸附的氢原子相互作用，释放出氢气。这种机制不同于多个水分子在铝团簇上析出氢气的互补活性位点机理，捕鱼模式的机理中三个金属原子之间的协同作用有效降低了决速步骤的能垒，使得单个水分子得以有效产氢。这种对于金属团簇HER机制的见解，为设计便携式氢能燃料电池新材料提供了一种新的可能。

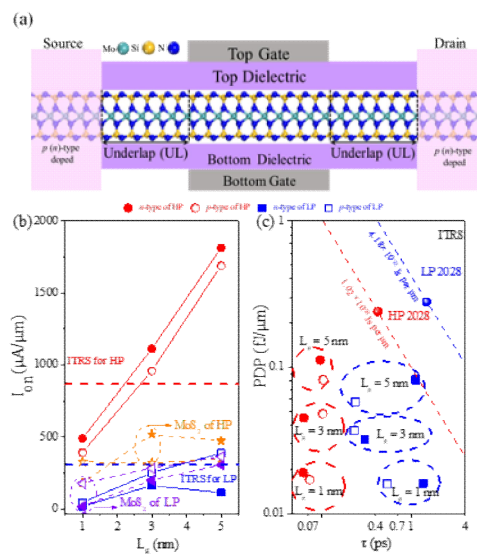
## 墙报题目：Performance limit of Monolayer MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> Transistors

作者：孙晓甜\*

洛阳师范学院 [xtsun2013@163.com](mailto:xtsun2013@163.com)

### 摘要：

Lately, a novel two-dimensional (2D) MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> has been successfully synthesized and is featured by high carrier mobility, moderate bandgap, and outstanding ambient stability (Science 369, 670, 2020). Through *ab initio* quantum transport simulation, we investigated the performance limits of the monolayer (ML) MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> metal-oxide-semiconductor field-effect transistors (MOSFET). We find that the optimized *n*- and *p*-type ML MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> transistors can well satisfy the key criteria of the International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) for the high performance (HP) application at the 3-nm gate length, while the *p*-type devices can also fulfill the requirement of low power (LP) application at the 5-nm gate length. By taking advantage of the negative capacitance (NC) effect, both the *n*- and *p*-type MOSFETs can achieve the ITRS LP goal when the gate length is decreased to 3 nm. The ML MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> MOSFETs generally outperform their MoS<sub>2</sub> counterparts. Hence, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> is a potential alternative to MoS<sub>2</sub> material to expand Moore's law beyond the sub-5 nm scale.





**墙报题目： The Effect of Doping Engineering on the Electronic  
Structure of Metastable  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: A GGA+U Viewpoint**

作者：王文静 李朝升\*

南京大学 447252050@qq.com

**摘要：**

As a potential photocatalytic material,  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is rarely studied for its potential internal properties. This study explored the electronic structure and effective mass of pure bulk  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> through density functional theory, and tried to improve its photocatalytic performance by doping Zr, Sn, Ti in  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, which design it to be more efficient photocatalytic materials. The results are calculated by the GGA+U method showed that, its regular octahedral distortion makes the photo-excited electron-hole pairs easier to separate after doping Zr, Sn, Ti in  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, thereby improving the photocatalytic performance of  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and increase the probability of electronic transition. At the same time, the close-packed crystal orientation [1 1 1] of pure bulk  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> has the smallest absolute value of effective mass; after  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is doped with Zr, Sn, Ti, the absolute value of the effective mass of the close-packed crystal orientation [1 1 1] of  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> is effectively reduced which improves the carrier mobility of the close-packed crystal orientation [1 1 1] of  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and it is an effective method for designing high-efficiency photocatalytic material  $\beta$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

**墙报题目: The effects of vacancy and heteroatoms-doping on the stability, electronic and magnetic properties of blue phosphorene**

作者: 王志勇\*

桂林理工大学 [zhiyongwang@glut.edu.cn](mailto:zhiyongwang@glut.edu.cn)

**摘要:**

In this work, we have systematically studied the stability, electronic structure and magnetic properties of the pristine, four defect states case of blue phosphorene and the six heteroatoms doping in blue phosphorene by first-principles calculations. In our findings, both defects and heteroatoms doping can regulate the band gap of blue phosphorene and the transition from indirect to direct band gap can be dramatically tuned by DV1BP, DV2BP and Al, Si atoms substitutional doping in blue phosphorene. The presence of defects and heteroatoms doping effectively modulates the electronic properties of blue phosphorene, rendering the defect-containing phosphorene semiconducting with a tunable band gap. Spin-orbit coupling can be induced by introducing SV-, DV- defects in blue phosphorene. The results provide theoretical guidance for future bandgap regulation and magnetism, defective and substitutional doping blue phosphorene may have potential electro-optical and electromagnetic applications.

**墙报题目: Ferromagnetic Dirac Half-Metallicity in Transition  
Metal Embedded Honeycomb Borophene**

**作者: 王燕遐 赵纪军\***

大连理工大学 [wangyanxia@mail.dlut.edu.cn](mailto:wangyanxia@mail.dlut.edu.cn)

**摘要:**

Exploring two-dimensional (2D) ferromagnetic materials with intrinsic Dirac half-metallicity is crucial for the development of next-generation spintronic devices. Based on first-principles calculations, here we propose a simple valence electron-counting rule to design such materials and endow them with good stability and desirable magnetic properties. Taking honeycomb borophene as a prototype, we demonstrate that embedding open-shell transition metal (like Cr) atoms in the hexagonal ring of boron atoms can provide two valence electrons to fully occupy the in-plane  $\sigma$  and out-of-plane  $\pi$  bands of B atoms. The remaining four valence electrons reside in  $d$  orbitals that split under  $C_{6v}$  symmetry, yielding a magnetic moment of  $\sim 2 m_B$  per Cr atom. The resulting  $\text{CrB}_2$  monolayer exhibits a Dirac half-metal band structure, a high Curie temperature of 175 K, and a large out-of-plane magnetic anisotropy energy of 4 meV/Cr simultaneously. Our work establishes a feasible route for the experimental realization of ferromagnetic Dirac half-metallicity in 2D materials and provides new opportunity to realize high-speed devices with low consumption.

**墙报题目： A two-dimensional ferromagnetic metallic material  
containing planar hexacoordinate Fe atom**

**作者： 赵莹 赵纪军\***

大连理工大学 [zy2123@mail.dlut.edu.cn](mailto:zy2123@mail.dlut.edu.cn)

**摘要：**

With the rapid development of two-dimensional (2D) materials, 2D planar hypercoordination materials with unusual chemical bonding have attracted extensive attention. Exploring the 2D magnetic hypercoordination materials with room temperature ferromagnetism and large magnetic anisotropy is the key to develop high-performance spintronic devices. Here, based on first-principles calculations, we predict a stable FeSi<sub>2</sub> metallic monolayer with a planar hexacoordinate Fe atom. FeSi<sub>2</sub> monolayer has anisotropic mechanical properties, room-temperature ferromagnetism and excellent thermal and kinetic stability which mainly contributed by abundant multicenter bonds. Moreover, we have predicted the synthesis possibility of the FeSi<sub>2</sub> monolayer by direct growth on Si (110) substrate. Further studies have shown that the FeSi<sub>2</sub> monolayer synthesized in this way can not only maintain its electronic and magnetic properties, but also be compatible with silicon semiconductor technology, so it can be better applied in spintronic devices.

**墙报题目: The Effect of Vacancy on Magnetic properties in  
Monolayer VSe<sub>2</sub>**

**作者: 朱严 赵纪军\***

大连理工大学 [1762712827@qq.com](mailto:1762712827@qq.com)

**摘要:**

The magnetic moments of reported monolayer (ML) 1T-VSe<sub>2</sub> on experimental measurement and theoretical prediction are quite different. Herein, based on density function theory (DFT), we investigate the effect of vacancy defects on magnetism in the VSe<sub>2</sub> monolayer. Totally 45 kinds of vacancies are considered, including single vacancy (S), double vacancies (D) and multi-vacancies. We find the formation energy of the structure with Se vacancy is quite lower than that with V vacancy, consistent with the experimental reports that Se vacancy is easy to form during the preparation process. Moreover, single vacancy and most double vacancies decrease the magnetic moment of per atom by 0.08-0.49 $\mu_B$ , while most of multi-vacancies, including triple (T) and quadruple (Q) vacancies enhance the magnetism by 0.04-0.40 $\mu_B$ . We conclude that ferromagnetic is the basic state of ML VSe<sub>2</sub> and vacancy defect is one reason of the discrepant magnetism between theory and experiment, providing a sort of possibility to explain the controversy, which has guiding significance for the preparation of ML VSe<sub>2</sub> in experiment.

**墙报题目：Nb<sub>11</sub>O<sub>15</sub>-超原子团簇的气相合成**

**作者：雷鑫 骆智训\***

中科院化学研究所 [smilelx@iccas.ac.cn](mailto:smilelx@iccas.ac.cn)

**摘要：**

过渡金属及其氧化物在催化、腐蚀、燃烧化学等领域的研究中都扮演着重要的角色。过渡金属氧化物的氧化态、电子和几何结构通常决定着金属氧化物本身的化学稳定性、反应活性以及光学或催化性能。气相团簇反应研究通常关注于团簇的催化位点、尺寸效应等，其研究结果对于揭示液体凝聚相以及固体的催化反应机理的具有重大的意义。

通过结合激光溅射团簇源、高分辨飞行时间质谱以及量子化学计算等方法，我们研究了在流动反应管内的铌团簇与氧气的反应。通过控制反应气的浓度以及反应气与团簇离子的反应时间，我们在气相中得到了一个具有突出稳定性的 Nb<sub>11</sub>O<sub>15</sub>-团簇产物。结合 USPEX 结构搜索和分子动力学模拟的结果，我们认为 Nb<sub>11</sub>O<sub>15</sub>-团簇的 11 个铌原子是具有一个铌原子体心的五棱柱结构，团簇分子中的 15 个氧原子处于五棱柱的 15 条棱边上形成 Nb-O-Nb 桥键，整个团簇具有 *D<sub>5h</sub>* 对称性。自然电荷布局分析结果表明处于体心的铌原子电荷为-0.804，分子的一个单位的负电荷几乎都在体心的铌原子上，周围的 Nb<sub>10</sub>O<sub>15</sub> 壳层接近于电中性，处于五棱柱上的铌原子氧化态接近+3。原子电荷轨道态密度分析、前线轨道分析和 AdNDP 成键分析的结果证实 Nb<sub>11</sub>O<sub>15</sub>-团簇具有超原子特性。



## 墙报题目：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

作者：魏萌 陈爽\*

南京大学 *meng13182308667@163.com*

### 摘要：

多功能性的有机-无机杂化钙钛矿在能源转换器件上的应用是当前功能材料领域的热点问题。其中，二维有机-无机杂化钙钛矿对比三维钙钛矿结构更加稳定、化学组成更加丰富，再加上成分依赖的电学性质、铁电性质可调等优点，成为了钙钛矿家族的明星材料。我们选取化学组成为  $A_2BX_4$  的二维有机-无机杂化钙钛矿作为模型体系，采用 DFT (density functional theory) 计算系统研究了化学组成的改变对该类材料电学性质的调控，以寻找带隙合适的适用于太阳能电池的候选材料；并且还研究了组成改变对该类材料铁电性质的调控。我们的设计工作发现通过有效的化学修饰能够先于实验设计面向应用的多功能性二维有机-无机杂化钙钛矿，给实验工作者提供了可供合成、表征的候选材料；也建立了该类材料半导体性质/铁电性质调控的原则，为加速该类材料的研发提供了理论依据。

**墙报题目: Pykp: A toolkit to construct the  $k \cdot p$  model at a high  
symmetry point**

**作者: 卢鑫 孙立忠\***

湘潭大学 [2284680915@qq.com](mailto:2284680915@qq.com)

**摘要:**

The  $kp$  model ( $kp$ ) is a semi-empirical method to analyze the electronic structure around the high symmetry points of materials. However, a universal software package to build it is not available. Here, we develop a Python toolkit Pykp to obtain the  $kp$  Hamiltonians for any point group. The irreducible representations of all 32 point groups are included in our code. As a result, the only required input information is the label of corresponding irreducible representations. In addition, Pykp can fit the parameters of the Hamiltonian matrix by genetic algorithm. Our paper shows the applications of Pykp in constructing the  $kp$  model in three-dimensional topological insulator  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , Dirac semimetal  $\text{Na}_3\text{Bi}$  and graphene, and two-dimensional semiconductor  $\text{MoS}_2$  monolayer. We anticipate that the Pykp will be an effective tool to analyze the characteristics of electronic, phononic or photonic bands.

**墙报题目：石墨烯/金属界面 Wiedemann-Franz 定律与  
量子输运**

**作者：翟麟鑫 徐志平\***

清华大学 *zhailx2020@163.com*

**摘要：**

Wiedemann-Franz (W-F) 定律描述了电子对金属热导的贡献与电导的相关性，在此基础上衍生出金属界面 W-F 定律与分子 W-F 定律。为了探究石墨烯/金属界面间的量子输运特性及相应的 W-F 定律洛伦兹系数的测定方法，我们采用非平衡格林函数 (NEGF) 方法对金石墨烯|金三明治结构的电子电导与声子热导进行计算，并通过改变其中的石墨烯层数探究其对两种输运形式的影响。计算结果表明，两层石墨烯之间的范德华界面对电子电导有着较好的屏蔽作用，因此仅插入单层石墨烯的体系存在显著的电子电导。而声子热导对层数不敏感。该结果对实验中测定该体系洛伦兹系数有指导意义：可以通过对插入单层与多层石墨烯的体系热导进行测定，二者的差值即为电子对热导的贡献，再与测定的插入单层石墨烯的体系电导相比，得到体系洛伦兹系数。作为该工作的延伸，可以通过对不同二维材料或者异质结量子输运行为进行探究，探索该结果的严谨性以及是否具有普遍意义。

**墙报题目: Mechanism of Nitrogen Doping Concentration  
Promotion on Nitrogen-Doped Carbon Materials**

**作者: 梁家毓 袁清红\***

华东师范大学 313550213@qq.com

**摘要:**

Experimental synthesis of nitrogen-doped carbon materials has a low nitrogen concentration and different types of nitrogen defects, which makes the improvement of the material mobility limited. In order to further prepare 2D nitrogen-doped carbon materials with high mobility, it is necessary to understand the theoretical mechanism of nitrogen concentration promotion in nitrogen-doped carbon materials. Therefore, this topic explores mechanism of nitrogen doping concentration promotion on Nitrogen-Doped carbon materials. Firstly, six different types of nitrogen-doped carbon materials structures were constructed under the condition of low concentration, and the relationship between their formation energy and nitrogen-doped concentration was calculated. It is found that at low concentration, the co-doped graphitic-N and pyridine-N triangular hole structure are more stable than other structures. Then, the contribution of nitrogen doping types to the formation energy of small triangular pores was quantitatively studied in a larger concentration range including high concentration. Finally, we obtain a concentration-dependent energy calculation formula for the co-doping of small triangular holes:  $E = \sum n_i * E_i$ ,  $I = 0, \dots, 8$ ,  $i$  represents element type. This is helpful to provide theoretical guidance for the synthesis of high concentration Nitrogen-Doped carbon materials.

**墙报题目: Non-metal atoms doped on BSe monolayer as a promising electrocatalysts for hydrogen evolution reaction (HER)**

**作者: 孟宋杰 路战胜\***

河南师范大学 [920305099@qq.com](mailto:920305099@qq.com)

**摘要:**

In order to explore BSe-based electrocatalysts, it is an effective step to use doping to break its surface inertness to regulate surface activity. Therefore, the design of efficient, stable and inexpensive metal-free electrocatalysts for the hydrogen evolution reaction (HER) could have an important impact on renewable energy technologies. Here we employ low-cost non-metal atoms systematically doped on the BSe monolayer to address the configuration, electronic structure and electrocatalytic properties by means of density functional theory (DFT) calculations. Our work provides insight into the important role of NM atoms in HER catalytic reactions and can provides evidence for the design of new NM atoms electrocatalyst with superior catalytic activity.

**墙报题目: First-principles exploring isovalent substitution in  
 $\text{Li}_3\text{In}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Cl}_6$  as fast ionic conductor**

**作者: 鲁征宇 周震\***

南开大学 [1220606188@qq.com](mailto:1220606188@qq.com)

**摘要:**

Halide solid-state electrolytes (SSEs) with high ionic conductivity, wider electrochemical window and better compatibility with electrodes have achieved great progress and attracted more interests in their use in all-solid-state lithium batteries (ASSLBs).  $\text{Li}_3\text{InCl}_6$  is one of the reported halide solid electrolytes with higher ionic conductivity. Isovalent substitution is an effective way to find potential candidates. In this work, we use the Alloy-Theoretic Automated Toolkit (ATAT) to identify phases of the lowest total energy at each composition. We found the lowest energy phases with  $\text{Sc}^{3+}$  partially occupying  $\text{In}^{3+}$  sites. The ionic conductivities of  $\text{Li}_3\text{In}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Cl}_6$  at 300 K to 900 K are calculated from AIMD simulations. To analysis the lattice structure and the diffusion trajectories of  $\text{Li}^+$  ions, we could conclude the reason for the change in ion conductivity after substitution. The results help us understand the transport mechanism of  $\text{Li}^+$  ions and give us ideas for designing new halide SSEs.

## 墙报题目：三原子金属团簇催化氮气活化与转化的研究

作者：崔超男 骆智训\*

中国科学院化学研究所 *chncui@iccas.ac.cn*

### 摘要：

氮气是空气中最主要的组成部分，是最丰富、最廉价的氮源，发展温和条件下氮气的活化与转化是当前催化领域的重要研究课题，也是实现节约能源、绿色化工的必然要求。氮气分子中  $\text{N}\equiv\text{N}$  三键的键能高 ( $941 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )，反应活性低，所以需要寻找合适的催化剂用以降低反应的活化能，提高反应效率。

过渡金属由于其具有丰富的 d 轨道电子，可以与氮气分子轨道相互作用，促进氮气活化，是催化剂的理想选择之一。其中小尺寸的金属团簇在很多化学反应的研究中表现出优异的反应活性。我们通过对比氮掺杂石墨烯负载不同尺寸铁团簇上电化学还原氮气的反应过程发现，三原子铁团簇可以有效降低反应的过电势。对氮气吸附结构进行轨道分析表明，氮气分子以 Side-on 的形式在三原子铁团簇上进行吸附，可以促进更多的电荷转移到 N-N 反键轨道，从而促进了氮气活化和解离。此外，利用我们课题组自主研制的深紫外飞行时间质谱仪，研究了等离子体辅助下  $\text{Rh}_n^+$  团簇对氮气的反应性，发现生成了多种含奇数 N 的团簇，说明 N-N 发生的解离，其中尤以  $\text{Rh}_3^+$  团簇的活性最高。进一步的理论计算表明， $\text{Rh}_3^+$  团簇吸附一定数目氮气分子后可以降低体系的能量，且容易与  $\text{Rh}_2^+$  团簇相互作用促进 N-N 解离。该部分工作为温和条件下实现氮气活化和解离提供了新思路。



## 墙报题目：调控卤氧化铋界面光生载流子分离与复合用于固氮

作者：赵艳艳 周思\*

大连理工大学 [zhaoyy@mail.dlut.edu.cn](mailto:zhaoyy@mail.dlut.edu.cn)

### 摘要：

开发用于清洁能源生产的高效光催化剂是一个巨大的挑战。光催化剂不仅需要快速的光生载流子分离，针对特定的化学反应必须具有优异的催化活性。为此，我们首次探索了廉价绿色的半导体卤氧化铋(BiOX, X = Cl, Br 和 I)界面上的氮还原反应(NRR)以及实时光生载流子的传输特性和催化机理。通过含时的从头算非绝热分子动力学模拟，我们的研究结果表明通过精准的能带结构工程可以同时优化激发态载流子的分离和重组过程以及催化活性。我们探索了杂质态和异质结对还原能力和光生载流子寿命的确切影响，以及揭示了 BiOX 光催化剂的光吸收、固氮反应的催化活性和选择性。此工作为提高半导体光催化性能用于太阳能转换和氢燃料存储提供了基本的理论指导。

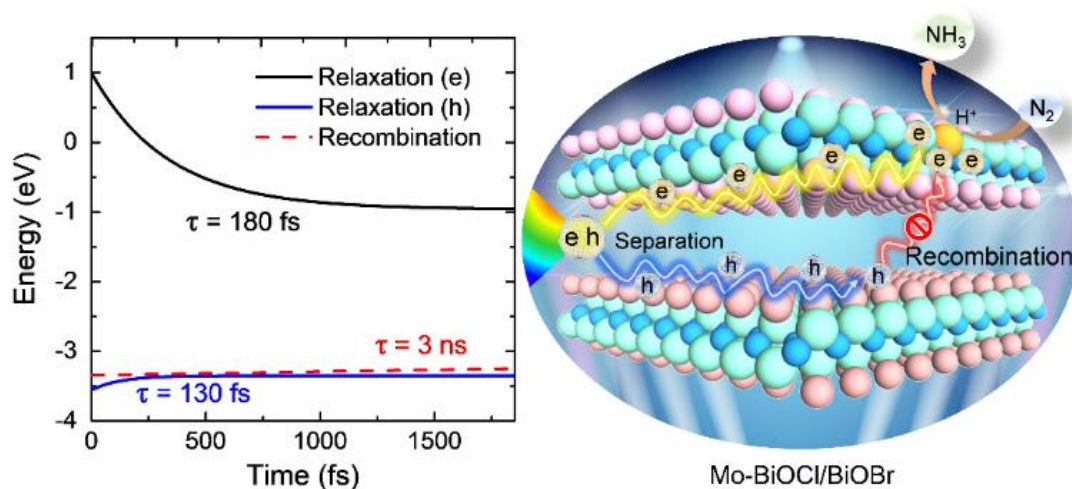


图. 1 Time-dependent energy change of electron and hole carriers in Mo-BiOCl and Mo-BiOCl/BiOBr during relaxation and recombination from NAMD simulations, and photocatalytic nitrogen fixation mechanism

**墙报题目: MBenes:用于氮还原反应(NRR)的新型电化学  
催化剂**

**作者: 杨小伟 周思\***

大连理工大学 739613266@qq.com

**摘要:**

MBenes, 新型的二维过渡金属硼化物, 一种类MXenes的硼化物, 由于其丰富的物理化学性质, 已经引起了科研工作者的广泛关注。目前, 在理论预言的基础上, 实验上已经成功合成了多种单层MBenes, 这些层状的MBenes具有优异的导电性和比表面积, 为在原子尺度上探索硼化物表面的催化性质提供了理想平台。在此工作中, 我们考虑了10种层状MBenes作为氮还原反应(NRR)中的电化学催化剂并且研究了其各自的催化性能。第一性原理计算表明MBenes在真实的水环境中具有良好的稳定性, 并且在NRR反应中能够有效的抑制析氢反应。特别地, 由于硼(金属)原子具有共存的占据和未占据的p(d)态, MBenes的表面硼和金属原子都可以作为反应活性位点。通过利用表面硼原子部分占据的p轨道, 可以在硼活性表面上获得优异的催化活性, 计算结果显示以硼为活性中心, 其外加电压低至0.03-0.26 V, 其催化活性优于金属活性位点。此外, 这些二维MBenes的催化活性可以通过本身的功函数进行调节。这些理论结果揭示了利用金属硼化物可以作为一种新的固氮催化剂, 阐明了控制其催化性能的基本原理。为各种能源应用中以原子精度操纵金属硼化物表面提供了重要的指导, 同时也为大规模利用硼化合物进行实际电催化打开了新的大门。

墙报题目：基于过渡金属掺杂蓝磷/MoSe<sub>2</sub>的范德华异质结的  
第一性原理探究

作者：朱云来 缪向水\*

华中科技大学 [zhu\\_2016@hust.edu.cn](mailto:zhu_2016@hust.edu.cn)

摘要：

近年来,二维材料的范德华异质结构由于其特殊的电学和光学性质而受到越来越多的关注,但异质结构大多是非磁性的,阻碍了异质结在自旋电子学中的应用。为了促进这些材料在自旋电子器件中的潜在应用,必须在这些材料中引入磁性。通过第一原理计算,我们系统研究了在蓝磷 (BlueP)/MoSe<sub>2</sub> 范德华异质结中掺杂过渡金属 (TM) 原子 (TM = Ni, Fe, Co, Mn)的结构、电学和磁学性质。研究了三种可能的层间掺杂位置,比较系统能量发现掺杂原子更倾向于占据上 P 原子和下硒原子之间的空隙位置。此外,我们还发现 TM 原子与蓝磷和二硒化钼双面共价结合,结合能在-3.91~-6.65 eV 之间。计算结果表明,除 TM = Ni 外,所研究体系均为铁磁体系,磁矩主要来源于 TM 原子。此外,掺杂 TM 原子的所有局域磁矩都小于它们的本征磁矩,所有被研究系统的相应带隙都大大减小。Co@BlueP/MoSe<sub>2</sub> 系统显示出自旋无隙半导体,Co@BlueP/MoSe<sub>2</sub> 和 Fe@BlueP/MoSe<sub>2</sub> 系统具有双极特性,可以通过施加栅极电压产生和控制具有可逆自旋极化的自旋极化电流。我们的发现为调控 BlueP/MoSe<sub>2</sub> 异质结构的电学和磁学性质提供了一种有效的方法,提高了在自旋电子器件中的应用潜力。

## 墙报题目：遗传算法在 ZnO 表面 H<sub>2</sub>O 吸附构型研究中的应用

作者：李东治 龚学庆\*

华东理工大学 [xgong@ecust.edu.cn](mailto:xgong@ecust.edu.cn)

### 摘要：

ZnO 是一种广泛使用的多相催化剂，其反应过程中 H<sub>2</sub>O 经常作为环境分子、反应物/产物，起着关键作用<sup>[1,2]</sup>。因此，明确 H<sub>2</sub>O 在 ZnO 表面的吸附状态，就能更深入理解 ZnO 的催化机理，为设计高效、稳定的催化材料提供理论基础。但由于传统手动模型构建的局限性，在预测 ZnO (11 $\bar{2}$ 0) 表面 H<sub>2</sub>O 吸附稳定构型时，结果与实验数据存在一定差异<sup>[3,4]</sup>。而近期随着计算化学领域的蓬勃发展，涌现出一批高效的智能优化算法，其中遗传算法 USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography) 应用广泛，在多体系中均取得了较好的结果<sup>[5]</sup>。因此，本课题组针对该问题，优化和改进遗传算法中结构生成和遗传操作程序，使用该算法并结合密度泛函理论，全局搜索在不同 H<sub>2</sub>O 覆盖度条件下 ZnO (11 $\bar{2}$ 0) 表面 H<sub>2</sub>O 吸附的最优结构，并建立一套能量分析和电荷分析策略，以此探究 ZnO (11 $\bar{2}$ 0) 基底与表面 H<sub>2</sub>O 分子之间的相互作用。结果表明在覆盖度不超过 1/2 ML 时，H<sub>2</sub>O 分子在 ZnO (11 $\bar{2}$ 0) 表面上呈分子吸附状态；而当覆盖度超过 1/2 ML 时，部分 H<sub>2</sub>O 分子开始解离，并形成了“3+1”的结构团。同时，本课题组还建立了一套电荷分析策略，将 H<sub>2</sub>O 分子和 ZnO 基底之间的作用以电荷变化的形式加以衡量，并且用其指出 H<sub>2</sub>O 分子与 ZnO 基底之间的作用是吸附体系得以稳定的主导因素。

墙报题目：不同状态下  $\text{CeO}_2(100)$  表面催化 CO 氧化反应的  
理论模拟研究

作者：周慧 王栋\*

华东理工大学 [wangd@ecust.edu.cn](mailto:wangd@ecust.edu.cn)

摘要：

二氧化铈( $\text{CeO}_2$ )因其卓越的储放氧性能而被公认为多相催化领域中一种多功能且稳健的材料，特别是， $\text{CeO}_2(100)$ 表面因其固有的极性而引起了广泛的兴趣。最近，我们课题组对两种重构的  $\text{CeO}_2(100)$ 表面<sup>[1]</sup>的结构和催化活性进行了研究，分别是 O 端（简称 O-t）和  $\text{CeO}_4$  端（ $\text{CeO}_4\text{-t}$ ）的重构表面。然而， $\text{CeO}_2$ 表面广泛存在的羟基是否以及如何影响其催化活性目前仍不十分清楚。在这项工作中，我们通过开展在位库仑相互作用校正的密度泛函理论计算(DFT + U)，确定了表面羟基在不同类型的重构  $\text{CeO}_2(100)$ 表面上对于 CO 氧化反应的作用机制。羟基化表面在结构、能量和电子特性方面的计算结果也与在清洁表面上获得的结果进行了比较。我们发现，表面羟基可以显著影响氧空位的形成和 CO 氧化反应的催化性能，然而这种羟基效应在 O-t 和  $\text{CeO}_4\text{-t}$  表面上表现出相反的效果。进一步的几何和电子结构分析表明，不同的羟基效应主要归因于  $\text{CeO}_4$  金字塔形覆盖层的精细结构，而 O-t 表面上表面氧反应性的提高主要由羟基弛豫主导。同时，表面低配位 Ce 被羟基占据无法定位多余的电子，则使得  $\text{CeO}_4\text{-t}$  表面上的 CO 氧化反应效率降低。另外，羟基弛豫和占据效应可能适用于其他基于  $\text{CeO}_2$  的材料，并可以作为表面羟基在一般多相催化反应中影响活性的代表性模式。

**墙报题目：2D V–VI Binary Nanosheets with Square Lattice: A**

**Theoretical Investigation**

**作者：乔鑫 李锋钰\***

内蒙古大学 [wqiaoxin@163.com](mailto:wqiaoxin@163.com)

**摘要：**

It is of paramount importance to explore novel two-dimensional (2D) materials with unique structural and physical properties that are promising to be applied in specific fields. In this work, we studied 11 monolayers with novel square lattices, including  $S\text{-SeN}_2$ ,  $S\text{-TeN}_2$ ,  $S\text{-SP}_2$ ,  $S\text{-SeP}_2$ ,  $S\text{-TeP}_2$ ,  $S\text{-SAs}_2$ ,  $S\text{-SeAs}_2$ ,  $S\text{-TeAs}_2$ ,  $S\text{-SSb}_2$ ,  $S\text{-SeSb}_2$ , and  $S\text{-TeSb}_2$ , via first-principles calculations and eventually only the  $S\text{-SeN}_2$  is stable. The  $S\text{-SeN}_2$  monolayer, where each Se atom is tetraordinated with four N atoms, and each N atom bridges two atoms, thus forming a tri-sublayer structure with square lattice, was verified as a stable 2D crystal, since it has high cohesive energy, all positive modes in phonon spectrum, and structural stability through molecular dynamics simulation up to 500 K. It is an indirect-bandgap semiconductor with high hole mobility, and the direct-bandgap feature can be easily obtained under external uniaxial compressions or biaxial tensions, which can be applied in electronics, photoelectronics, etc.

**墙报题目：A Library of Two-Dimensional Square Disulfide Monolayers via Computational Explorations**

作者：刘宇 李锋钰\*

内蒙古大学 [liuyuimu@163.com](mailto:liuyuimu@163.com)

**摘要：**

Based on the density functional theory (DFT) computations, we constructed 68 two-dimensional (2D) disulfide monolayers with square lattice and examined their thermodynamical, dynamical, mechanical and thermal stabilities. We found ten stable structures, denoted as  $S\text{-XS}_2$  ( $X = \text{Si, Ge, Sn, Ti, V, Mn, Zr, Mo, Re}$  and  $\text{Os}$ ) monolayers. All the ten stable monolayers have low in-plane Young's modula ( $28.55\sim 96.37 \text{ Nm}^{-1}$ ), among which three  $S\text{-XS}_2$  ( $X = \text{Si, Ge}$  and  $\text{Sn}$ ) monolayers possess negative Poisson ratios (NPRs). The  $S\text{-MoS}_2$ ,  $S\text{-ReS}_2$  and  $S\text{-OsS}_2$  monolayers are nonmagnetic and metallic, the  $S\text{-MnS}_2$  monolayer is antiferromagnetic and metallic, the  $S\text{-SiS}_2$ ,  $S\text{-GeS}_2$ ,  $S\text{-SnS}_2$ ,  $S\text{-ZrS}_2$ , and  $S\text{-TiS}_2$  are nonmagnetic and semiconducting (bandgaps in the range of  $2.15\sim 2.79 \text{ eV}$ ), and the  $S\text{-VS}_2$  is a ferromagnetic semiconductor with a direct (indirect) bandgap of  $1.24$  ( $2.67$ )  $\text{eV}$  in spin-up (spin-down) channel. Among these semiconductors, the carrier mobilities are ranging from  $1.74$  to  $17068.47 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ , of which the  $S\text{-ZrS}_2$ ,  $S\text{-TiS}_2$  and  $S\text{-VS}_2$  monolayers have heavy and light holes, the hole mobility can be modulated by applying uniaxial strain. As for photocatalytic performance, two  $S\text{-XS}_2$  ( $X = \text{Si}$  and  $\text{Ge}$ ) structures can be promising candidates for photocatalyzing water splitting. In addition, among the metallic monolayers, two  $S\text{-XS}_2$  ( $X = \text{Re, Os}$ ) monolayers can boost hydrogen evolution reaction (HER) at specific H coverage condition. Our work not only adds new members to the family of 2D materials, but also provides theoretical guidance for further explorations for both experimental and theoretical communities.



**墙报题目: Revisiting the Catalytic Activity of double-atom catalysts for Oxygen Reduction Reaction from the First Principles Considering Magnetic Coupling**

作者: 余林柯 李锋钰\*

内蒙古大学 *yulinke2020@163.com*

**摘要:**

During the last few years, double-atom catalysts (DACs) embedded in graphene have been extensively studied in oxygen reduction reactions (ORR). In our study, ten DACs catalysts CoM-N-C(OH) (M = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) were selected and their ORR catalytic activity was found to be different when magnetic variation was considered and not considered by density functional theory (DFT) calculations. We found that the three catalysts CoNi-N-C(OH), CoCu-N-C(OH) and CoZn-N-C(OH) exhibited good ORR catalytic performance when magnetic variations were considered, with their limiting potentials of 0.90 V, 0.89 V and 1.00 V, respectively. We also proposed the theoretical hypothesis that magnetic changes can promote ORR reaction efficiency, and verified our theory by analyzing the electronic structure of the catalyst when magnetic coupling are considered and not considered. And we found that the d-band center and new descriptor P are good descriptor for the catalytic activity of the ORR. We hope that our proposed magnetic variation can enhance the ORR catalytic activity theory will be useful for future development of new ORR catalysts or improvement of the efficiency of existing ORR catalysts.

**墙报题目: Polyoxometalate Cluster Based Single-Atom Catalyst with High Performance for Water Splitting and Oxygen Reduction Reaction**

**作者: Shamraiz Hussain Talib 路战胜\***

河南师范大学 *luzhansheng1688@126.com*

**摘要:**

Although extensive developments have been made in limited-reactions of industrial processes on the single-atom catalyst (SAC), the nature of the dynamic sites, the source of the superb catalytic execution, and the reaction mechanisms are still the topic of discussion. Here, by means of first principles calculations, we propose a new strategy using a transition metal single-atoms catalyst anchored on a polyoxometalate (POM) cluster as a heterogeneous catalyst for the water splitting (HER/OER) and oxygen reduction reaction (ORR). It has been found that the catalytic activity of SACs is determined by the fourfold hollow (4H) site on the POM cluster. Owing to their higher stability and outstanding electronic conductivity, fast electron transfer kinetics is permissible during catalysis. Specifically, Pt<sub>1</sub>/PMA, Ru<sub>1</sub>/PMA, V<sub>1</sub>/PMA, and Ti<sub>1</sub>/PMA possess decent catalytic performance towards HER owing to nearly ideal ( $\Delta G_{H^*} = 0$ )  $\Delta G_{H^*}$  values through the Volmer-Heyrovsky mechanism. The Co<sub>1</sub>/PMA (0.45 V) and Pt<sub>1</sub>/PMA (0.49 V) can be active catalysts for OER with their overpotentials comparable to MoC<sub>2</sub>, IrO<sub>2</sub>, and RuO<sub>2</sub>. Among the considered candidates, Fe<sub>1</sub>/PMA SAC is a promising electrocatalyst for ORR with an overpotential of 0.42 V, which is lower than the most favorable Pt (0.45 V) catalyst. Furthermore, Pt<sub>1</sub>-PMA is a promising multifunctional electrocatalyst for overall water splitting (-0.02 V for HER and 0.49 V for OER) and metal-air battery (0.79 V for ORR) catalyst. The present study is further extended to calculate the kinetic potential energy barrier for the excellent catalytic performance of Co<sub>1</sub> for OER and Fe<sub>1</sub> for ORR. These results provide the innovative valuable guidance to produce HER, OER and ORR by single atom electrocatalyst under ambient temperature with high reactivity and low cost.

墙报题目：硫化物电解质中的力学-化学耦合

作者：富忠恒\*

清华大学 [fuzhongheng@mail.tsinghua.edu.cn](mailto:fuzhongheng@mail.tsinghua.edu.cn)

摘要：

在固态电池的制造装配过程中，外部加压可以减少晶粒尺寸，改善固-固接触从而提高固态电解质的离子导率，目前已被广泛应用。然而应力对固体电解质材料本征离子导率的影响机制目前尚不明晰。在本报告中，我们运用第一性原理计算揭示拉伸应力与压缩应力对硫化物电解质  $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$  (LGPS) 离子导率的影响。我们发现拉伸应力会使 LGPS 离子导率增加，压缩应力会使 LGPS 离子导率降低。晶格体积、瓶颈尺寸、锂空位形成能和锂巴德电荷可以作为描述符，很好地描述 LGPS 离子导率在应力下的演变。与指前因子相比，LGPS 离子导率与活化能具有更好的相关性，表明应力与温度对离子导率影响的协同作用。在低温下，应力对离子导率的影响更加显著。这些结果揭示了固态电解质中力学化学耦合机制，为固态电解质实用条件下的理性设计提供理论指导。

**墙报题目: Slater Koster parametrization for the phonons of  
monolayer MoX<sub>2</sub>**

**作者: 潘保儒 周攀\***

湘潭大学 201821521331@smail.xtu.edu.cn

**摘要:**

In recent years, two dimensional transition metal dichalcogenides have attracted some attention in many fields due to their unique properties and their potential applications in (opto-)electronics. Many of their physical processes are related to emerging applications such as the dynamics of carriers and excitons, the attenuation of valley polarization, and the relaxation of spins, all of which depend critically on phonons. For example, the direct band gap of two dimensional transition metal dichalcogenides has high performance in optoelectronic applications, such as the reported ultra high on/off ratio of MoS<sub>2</sub> transistors at room temperature. It is based on this view that people very much hope to obtain relevant research on the phonon dispersion relationship of two dimensional transition metal dichalcogenides.

In this paper, we use the Slater Koster parametrization to construct a tight binding models to describe the phonon of MoX<sub>2</sub>. Based on this model, we found that the approximate shape of the phonon band can be fitted by only considering the fourth nearest force constants. By fitting the first principle phonon dispersion, we find that the model can describe all the symmetries and semimetallic states of MoX<sub>2</sub> well with the appropriate force constant coefficient. Then we use tensor representation theory to explain the irreducible representations at high symmetry points  $\Gamma$ , M and K. According to the irreducible compatibility relationship between the high symmetry point and the high symmetry line, we find that the semimetal state of MoX<sub>2</sub> is protected by horizontal or vertical mirror symmetry. In view of the fact that many interesting physical properties are related to phonons, two dimensional transition metal dichalcogenides will be ideal examples to illustrate the basic physical phenomena related to topological phonons besides graphene, which may include heat conduction, resistance and phonon waveguides, as well as the electron phonon coupling effect of superconductivity.

**墙报题目: Effects of the Introduced in-Gap Bands on  
Photoluminescence of Cs<sub>2</sub>XCl<sub>6</sub> (X = Sn, Ti, Zr, Hf)  
Perovskites: A First-Principles Study**

**作者: 高振任 孙立忠\***

湘潭大学 [gaozhenren@hotmail.com](mailto:gaozhenren@hotmail.com)

**摘要:**

In recent years, research progresses on photoluminescence of perovskite have come a long way since the improvement of experimental conditions and development of high-throughput computing methods. The perovskite with excellent photoluminescence properties has potential applications in display and lighting. Although the luminescence of some perovskites are weak or even absent, doping and substitution are important means to improve their luminescence. For example, the phenomenon of non-luminescence has been observed in pure Cs<sub>2</sub>SnCl<sub>6</sub>, but the Sb-, Bi-, and Te-doped Cs<sub>2</sub>SnCl<sub>6</sub> can exhibit broadband orange-red (602 nm), blue (455 nm), and yellow-green (580 nm) luminescence with the photoluminescence quantum yield of 37% (0.59% Sb), 78.9% (2.75% Bi), and 95.4% (11% Te), respectively. In addition, materials such as Cs<sub>2</sub>HfCl<sub>6</sub> and Cs<sub>2</sub>ZrCl<sub>6</sub> have also received attention as promising materials. Unfortunately, the origin of luminescence is still controversial, and more researches are required to find more materials with good luminescence.

Herein we performed 25% single substitution of X atom with Y atom based on these wide band-gap semiconductors in chemical formulae of Cs<sub>2</sub>XCl<sub>6</sub> (X=Sn, Ti, Zr, Hf), and explored the effects of the introduced ingap bands (IGBs) on transitions and luminescence using the first-principles calculations and transition dipole moment (TDM) associated with inversion symmetry-induced parity-forbidden transitions. We find that single or even multiple sets of IGBs (SIGBs) are introduced into the energy bands, and the two SIGBs with opposite parities play an important role in the electronic transitions and optical absorptions, which indicates that its good luminescence should be present if there is no accident. In addition, these IGBs introduced by Y atom are the main targets affected by spin-orbit coupling (SOC), and the larger splitting may further reduce the bandgap and increase the pathways of electronic transitions. Moreover, the SOC may not change the conclusion on the nature of parity.

## 墙报题目：第一性原理计算在离子电池电极材料研究中的应用

作者：杨晨 吕劲\*

北京大学 [yangchen96@pku.edu.cn](mailto:yangchen96@pku.edu.cn)

### 摘要：

离子电池是未来能源可持续发展的答案之一，目前最商业成功的锂离子电池负极材料仍然是石墨。随着工艺的成熟，石墨负极已经达到了其理论极限的 372 mAh/g 锂离子存储容量，无法满足进一步储能需求；此外，锂元素的价格也逐渐上升，锂离子电池性价比逐年降低。因此，寻找新型高容量离子电池电极材料是一个紧迫而且重要的话题。第一性原理计算是研究离子电池电极材料必不可少的工具之一，我们将展示基于第一性原理计算在离子电池电极材料预测和分析方面取得的研究成果。

首先，我们尝试对传统的石墨负极进行打孔修饰，研究层状石墨纳米网材料作为锂/钠/钾离子电池负极性能。打孔释放了石墨的层间距和更多的离子吸附位点，使锂/钠/钾离子存储容量分别扩大到石墨负极存储极限的 4/10/2 倍以上。层间距工程对层状材料作为离子电池电极性能有更深层次的影响，我们基于石墨负极系统研究了层间距工程的作用。层间距工程的极限是把层状材料变为二维材料，考虑到二维负极材料更广吸附位点的优势，我们预测了二维  $C_4N$  材料具有极高的约 2000 mAh/g 理论锂离子存储容量，层状吸附锂离子间的电子云是其稳定高容量的保障。

理论与实验结合，我们提出了一种新型钠离子正极材料  $Na_3Fe_2(PO_4)P_2O_7$ 。在 20C 下，该材料循环 6400 圈后容量保持率高达 89.7%，第一性原理计算揭示了材料内部的钠离子扩散过程。结合原位电镜等技术和第一性原理计算，我们系统研究了氟化石墨电池正极中锂/钠/钾离子的扩散性质，提出了  $V_5S_8$  负极材料中充锂相变可能是由于两相之间离子扩散势垒的变化导致，并解释了  $SiO_2$  包裹后  $Fe_2O_3$  负极充锂过程中倍率特性变好可能是由于二者充锂过程中体积模量变化不同导致。

综上，这些工作表明，第一性原理计算对离子电池电极材料研究具有重要的意义。

## 墙报题目：二维 MOFs 中配体和应力调控析氢性能

作者：任泽斌 戴瑛\*

山东大学 202012202@mail.sdu.edu.cn

### 摘要：

尽管基于金属有机框架 (MOF) 用于析氢反应 (HER) 的催化剂受到较多关注, 但性能的增强仍然具有挑战性。根据最近的实验进展, 我们提出了一系列由过渡金属 (TM) 原子 (TM = Sc、Ti、V、Cr、Mn、Fe、Co、Ni) 和苯六硫醇 (BHT) 组成的 TM-BHTs。通过第一性原理计算评估了 TM-BHT 对析氢反应 (HER) 的催化性能。其中, Fe-BHT 是 TM-BHTs 中最有效的 HER 催化剂, 过电位为 0.09 V。此外, 通过构建一系列 FeS<sub>4-x</sub>N<sub>x</sub> (x = 1, 2, 3, 4) 活性中心来研究配体对 HER 的影响。结果表明, 与不同配体连接的 Fe 的 d<sub>z<sup>2</sup></sub> 轨道中心可以作为氢原子与基底相互作用强度的有效描述符, 可用于优化催化活性。我们还进一步探究了应力效应对 Fe-BHT 催化活性的影响。结果表明, 压缩应力有利于提高 HER 活性, 比原始 Fe-BHT 具有更理想的过电位。不同应力对氢的吸附活性的影响也来源于 d<sub>z<sup>2</sup></sub> 轨道中心。值得注意的是, 这项工作不仅提出一系列新的 HER 的 2D-MOF 电催化剂, 而且还阐明了设计高效电催化剂的有效策略。



**墙报题目：二维  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  用于光催化水分解的探究**

**作者：刘虹伶 戴瑛\***

山东大学 *15666428550@163.com*

**摘要：**

光催化水分解技术是解决能源危机、提供可再生清洁能源的一种有前景的技术。近年来,虽然提出了许多二维材料作为光催化的候选材料,但仍缺乏有效调节光催化反应的策略。由于铁电极化可以很好地调节电子性质,极化可以显著影响光催化活性和水分解效率,因此具有垂直本征电场的二维材料在抑制光生载流子复合和拓宽光吸收区等方面具有广阔的应用前景。我们从金属磷三卤族化合物家族中选择了在室温下具有稳定面外极化的  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$ ,以密度泛函理论为基础,结合  $\text{G}_0\text{W}_0\text{-BSE}$  探究了单层  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  具有合适的能带结构,同时本征极化产生内建电场,有利于载流子的分离,从而提高光催化效率。此外,与单层  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  相比,双层  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  具有更小的带隙和更大的内部电场,使得光吸收扩展到可见光区域,同时激发态电子和空穴会在顶层和底层分离,进一步抑制了光生载流子的复合,在光催化水分解中具有很好的应用前景。

**墙报题目：Janus ZrSSe 和 HfSSe 的纵向和横向异质结构的  
电子性质**

**作者：王鑫鑫 戴瑛\***

山东大学 [xxwangne@163.com](mailto:xxwangne@163.com)

**摘要：**

异质结构一直是现代半导体工业应用的重要材料基础，在电子和光电器件中发挥着至关重要的作用。将二维过渡金属硫族化合物的单层结合在一起形成纵向异质结构和横向异质结构会产生新颖的和意想不到的电子性质。基于密度泛函理论的第一性原理计算，我们对由 ZrSSe 和 HfSSe 单层构成的纵向和横向异质结构的结构与电子性质进行了研究。发现在 ZrSSe/ZrSSe、HfSSe/HfSSe、ZrSSe/HfSSe 纵向异质结中 5 种堆叠构型的带隙几乎相同，意味着不同堆叠构型的层间作用基本相同；ZrSSe/HfSSe 的横向异质结构显示了 II 型能带对齐，并且发生了由间接带隙到直接带隙的转换；在 T-ZrSSe/H-ZrSSe/T-ZrSSe 的横向排列结构中，ZrSSe 的 H 相可以稳定存在，并且随着宽度的增加，体系发生由半导体到金属的转变。

**墙报题目: Stable Multifunctional Single-atomic Catalysts  
Resulted from the Synergistic Effect of Anchored  
Transition-metal Atoms and Host Covalent-organic Frameworks**

**作者: 王娟 赵明文\***

**山东大学 1154481576@qq.com**

**摘要:**

Noble-metal-free electrocatalysts for highly-efficient hydrogen evolution reaction (HER), oxygen evolution reaction (OER) and oxygen reduction reaction (ORR) are highly demanded in energy conversion and storage techniques. Single-atomic catalytic (SAC) technique emerged as a promising strategy to reach this goal but is currently facing obstacles such as migration and aggregation of active atoms and low metal loading. We demonstrated from first-principles that the two-dimensional (2D) covalent organic frameworks (COFs) of phthalocyanines and pyrazine linkages can firmly anchor transition metal (TM) atoms. The resulted TM-embedded COFs (TM-COFs) exhibit multifunctional electrocatalytic activity for HER, OER and ORR, which can be attributed to the synergistic effect of the anchored TM atoms and COFs. Specifically, Mn- and Cr-COFs are predicted to have extremely low overpotentials of -0.014/0.44/0.31 and -0.239/0.35/0.29 V for HER/OER/ORR, which are comparable or even superior to those of the well-developed noble catalysts. We also proposed the electron transfer  $\Delta\delta$  from TM atom to the framework and p band center  $\varepsilon_p$  of carbon atoms as descriptors for the adsorption strength of intermediates on the TM-COF monolayers. In view of the recent experimental progresses on the synthesis of the TM-COFs, these computational results offer not only economical alternatives of noble catalysts but also a promising strategy for the design of multifunctional electrocatalysts.

**墙报题目: Electronic structure and enhanced photocatalytic properties in Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC van der Waals heterostructure**

作者: 杨哲 任俊峰\*

山东师范大学 2848915303@qq.com

**摘要:**

The electronic structure and photocatalytic properties of Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC van der Waals heterostructure (vdWH) have been investigated through first principles calculation based on density functional theory. The calculation results show that among GeC monolayer, Ca(OH)<sub>2</sub> monolayer and Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC vdWH, the Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC vdWH has the smallest band gap. The charge is transferred from the Ca(OH)<sub>2</sub> layer to the GeC layer when the heterojunction is synthesized. And the vdWH improves the absorption in the visible light range (1.6 eV < E < 3.1 eV) compared with that of GeC. The VBM potential of Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC is higher than that of the GeC monolayer, so the oxidation ability of holes of Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC vdWH is stronger than that of GeC monolayer. And the Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC vdWH also satisfies the requirement for photocatalytic overall water splitting. These characteristics of the Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC show great application potential in the field of optoelectronic devices and photocatalysis.

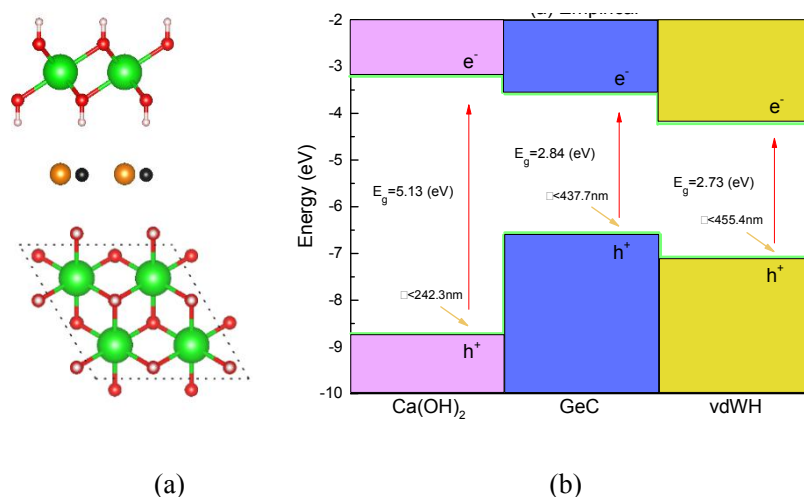


图 1. (a) The side and top views of three stacking patterns of the Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC vdWHs. Green, red, pink, brown, black balls represent Ca, O, H, Ge and C atoms, respectively. (b) Band alignment of the GeC monolayer, Ca(OH)<sub>2</sub> monolayer, and Ca(OH)<sub>2</sub>/GeC vdWH.

**墙报题目: Ideal topological phononic nodal chain in  $K_2O$   
materials class**

**作者: 陈映杉 周攀\***

湘潭大学 *China.lzsun@xtu.edu.cn*

**摘要:**

Topological semimetal states in solid systems provide excellent platforms to study the fermions beyond the elementary particles in high energy physics. Among them, nodal rings have attracted much attention because they can form many fascinating topological configurations, such as nodal chains, nodal links, nodal knots. A nodal chain is composed of a series of tangent nodal rings and have been proposed in low-energy electronic states of several materials. However, the nodal chains of electrons are generally fragile to the spin-orbit coupling (SOC), for example, the nodal chain in HfC will be transformed into Weyl semimetal after considering SOC. Therefore, nodal chains were only observed in the electronic states of  $TiB_2$  with negligible SOC and photonic crystal or phononic crystal. So far, nodal chains haven't been reported in the phonon system of atomic crystals yet.

In this paper, we first predict the existence of nearly ideal phonon nodal chain in the cubic  $K_2O$  material class. It is worth to emphasize that most of these materials have been synthesized in experiments, which means that these materials are excellent candidates to study nontrivial phonon nodal chains. Our calculation result shows that, the nodal chain exhibits very small frequency dispersion in reciprocal space. Different from all previous cases, the connection points of the nodal chain in  $K_2O$  are located at the high symmetry points W and the positions are limited by the symmetries. The nodal rings that forming the nodal chain are symmetrically equivalent and protected by the mirror symmetries. A general discussion about all symmorphic space groups reveals that, if no more than two inequivalent mirrors exist, Fm-3m (No. 225) is a unique space group for the appearance of the nodal chain connected at the high symmetry points. Our studies demonstrate that  $K_2O$  materials class is a wonderful implementable platform to study the nontrivial topological nodal chains in phonon systems.

**墙报题目： A novel carbon-nitrogen Dirac semimetal  $C_5N_4$   
monolayer**

**作者：李文琪 周攀\***

湘潭大学 [zhoupan71234@xtu.edu.cn](mailto:zhoupan71234@xtu.edu.cn)

**摘要：**

Two-dimensional carbon-nitrogen materials have attracted great interest owing to their excellent performance and potential applications. However, most of these materials exhibit metallic and semiconductor properties. Based on the first-principles calculations and the RG2 search method, we proposed a novel two-dimensional carbon-nitrogen semimetal  $C_5N_4$ , with Dirac cones are rightly located at the Fermi level. The Dirac point of the system is mainly contributed by the pz orbitals of C and N atoms. According to band representation theory the topological properties of the system is protected by mirror symmetry. And we find that based on HSE06 hybrid functional calculation, when the strain reached 6 %, the Dirac point of the system still existed, indicating that the Dirac point robust against external strain. Moreover, the results of phonon dispersions, ab initio molecular dynamics, and linear elastic constants show that its stability is correspond to the already-synthesized 2D carbon nitride materials. This study will provide a theoretical basis for the experimental study of  $C_5N_4$  monolayer materials and provide topological semimetal candidate materials for high performance electronic devices.

**墙报题目: Fully spin-polarized nodal chain state in  $V_2Zn_4O_8$   
spinel half metals**

**作者: 何沈达 周攀\***

湘潭大学 [zhoupan71234@xtu.edu.cn](mailto:zhoupan71234@xtu.edu.cn)

**摘要:**

More recently, the concept of Nodal-chain fermions have been proposed and widely discussed, which is expected to be a good platform for further studies into topological electronics. Based on first-principles calculations and symmetry analysis, a half metallic nodal chain spinel,  $V_2Zn_4O_8$ , with 100% spin-polarized electronic state near the Fermi level was demonstrated. In  $V_2Zn_4O_8$  spinel, it's ferromagnetic ground state presents half metallic band structure and the nodal rings only appear in one spin channel near the Fermi level. The nodal rings arise from band inversion, and on the basis of two kinds of mirror symmetry protections, the rings are accordingly divided into two type. Importantly, we find that the rings connect with each other and compose a chainlike electric structure. Further more, surface state also testify the nodal chain. The fully spin-polarized bulk nodal-chain and nontrivial surface state prove the great application of  $V_2Zn_4O_8$  spinel in topological spintronics devices.



**墙报题目：TM 单层修饰的 MXene 的稳定性和 ORR/OER 双功能催化研究**

**作者：杨新伟 杨宗献\***

河南师范大学 63184805@qq.com

**摘要：**

寻找低成本、高活性和热稳定的双功能电催化剂进行氧还原和析出反应(ORR/OER)是开发可再生能源设备的关键。我们使用密度泛函理论系统地研究了 Ti<sub>2</sub>C、Zr<sub>2</sub>C、Hf<sub>2</sub>C、V<sub>2</sub>C、Nb<sub>2</sub>C、Ta<sub>2</sub>C、Cr<sub>2</sub>C、Mo<sub>2</sub>C、W<sub>2</sub>C 等 MXene 衬底负载 Pt 的物理性质、结构稳定性和 ORR/OER 双功能催化活性。结果表明：由于金属-载体之间的强相互作用，Pt 原子在 MXene 载体上均匀分散，在高温和氧化条件下具有较高的结构稳定性。研究发现 MXene 的晶格参数对这些异质结构的形貌和稳定性起着至关重要的作用，并提出了一种用于设计 MXene 异质结构的描述符。特别是，Pt/V<sub>2</sub>C 被认为是最稳定和最有前途的双功能催化剂，其过电位可与基准催化剂 Pt (1 1 1)和 IrO<sub>2</sub> 相媲美。这项工作为寻找和设计基于能源应用的优良 TM/MXene 催化剂提出了新的策略。

**墙报题目: First principles study, geometry and electronic structure of two-dimensional Nb<sub>2</sub>CT<sub>x</sub>MXenes**

**作者: 王晶 杨宗献\***

河南师范大学 1619488239@qq.com

**摘要:**

The various properties of MXenes can be further adjusted by controlling their surface composition. Exploring the geometric and electronic structures of MXenes with different functional groups is a key step to develop high-performance 2D materials. In this work, depending on the position of groups, we consider three major structural phases. In the I-configuration, the functional group is adsorbed on the top of the C atom on both sides of MXenes. However, on one side of MXenes, the functional groups are adsorbed on hollow site of the lower Nb(2) atom, on the other side of MXenes, the functional groups can be either adsorbed on the top of C (II-configuration) or on hollow site of the lower Nb(2) atom(III-configuration). We have systematically studied the relationship between electronic structure and relative position by first principles in the framework of density functional theory. The result shows that three different configurations lead to different stabilities. For O and Te, the functional groups tend to be adsorbed on hollow site of the lower Nb(2) atom, the third configuration is the most stable, while for S and Se, the stable phase is II, we find that the stability of structure originates from the enhancement of Nb-C interactions and therefore their semiconducting band gaps critically depend upon the transition metal Nb. For O and Te terminal groups, the three different structures have metallicity. By adjusting the position of S and Se, the band gap of Nb<sub>2</sub>CS<sub>2</sub> and Nb<sub>2</sub>CSe<sub>2</sub> can be adjusted to open the band gap and make them become semiconductor materials. In addition, with the decrease of the electronegativity of functional groups(O > S > Se > Te), the strength of the chemical bond of Nb-T<sub>x</sub> weakens, and the surface bonding is weakened. Covalent functionalization of MXenes surfaces is expected to uncover new directions for rational engineering of 2D functional materials.

**墙报题目：理论计算评价光催化剂 VOCs 降解性能：g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>  
dots/graphene 为例**

**作者：景冰花 敖志敏\***

广东工业大学 1210300628@qq.com

**摘要：**

挥发性有机污染物 VOCs 是典型的大气污染物,对气体环境和人体健康产生严重的影响。因此,控制 VOCs 在大气中的排放刻不容缓。目前利用光催化剂降解污染物来有效控制 VOCs 的技术手段吸引了研究者的广泛关注。虽然在实验过程中已采用多种技术手段去研究高效光催化剂,并了解对应的催化机理,但对于从电子和原子水平深入剖析光催化机理,依然具有极大的挑战。而基于第一性原理的密度泛函理论(DFT)计算能够很好的解决这一问题。但目前来说,从 DFT 计算角度来评价光催化降解污染物性能和机理的方法一直没有被系统的总结,使得光催化剂在电子和原子水平的研究参差不齐。

众所周知,光催化降解有机污染物主要是利用光激发生成的电子空穴对去活化吸附在催化剂表面的水,氧气以及其他的氧化物,使其生成羟基自由基和超氧离子自由基,并利用这些自由基使污染物降解为更为清洁的二氧化碳和水。因此从以下几点来评价光催化剂的性能和机理:①能带结构、价导带位置以及光吸附利用率,以此判断光生电子空穴对效率;②对水、氧气以及其他氧化物的吸附性能,判断活性自由基的生成情况;③对污染物的吸附能力;④降解污染物的路径和能力。

由于石墨烯具有优异的导电性,可能会增强 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 量子点的电子迁移率,从而延长电子空穴对寿命,于是以 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> dots/graphene 为例来阐述并验证提出的从理论计算角度评价光催化剂降解 VOCs 性能和机理的方法。结果表明 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> dots/graphene 可以提高可见光利用率来有效生成光生电子空穴对,促进羟基自由基和超氧离子自由基的生成,作用于光催化降解 VOCs。重要的是,电子从 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 量子点价带经过石墨烯这个跳板,跃迁到 g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 量子点的导带上,在提高可见光利用率的同时,抑制了光生电子空穴对的复合。该工作不仅总结了在理论计算方面评价光催化剂性能和机理的方法,同时还阐述了一种新颖的电子跃迁机制,为合理的从 DFT 计算角度评价光催化剂性能和机理提供了有效指导。

墙报题目：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

作者：李倩菀 敖志敏\*

广东工业大学 395332757@qq.com

摘要：

工业过程中化石燃料的不完全燃烧会产生大量的空气污染物 CO，解析 CO 在催化剂上的氧化机理对开发高效氧化 CO 的催化剂具有重要意义。本研究采用密度泛函理论计算方法研究了 CO 在双原子催化剂 TM/UiO-66 (TM=Pd、Pt、Cu、Ag、Au、Zn 和 Cd) 上的吸附和氧化分解过程。分波态密度(PDOS)，电荷分析以及氧化分解路径计算等结果表明所有 TM/UiO66 体系的结构具有较好的稳定性，并且与本征 UiO-66 相比，过渡金属掺杂后，CO 的氧化效果都显著提升，其中效果最优的体系为 Zn、Pd 和 Ag 掺杂的体系，它们的最佳反应机制不尽相同，反应的限速能垒分别为 0.14、0.11 和 0.22 eV。为了探索不同催化剂催化性能不同的影响因素，我们从几何结构，电子结构和吸附能三个方面对各个体系进行了对比分析。结果表明：首先，在一定范围内，过渡态(TS)结构的 OC-O 距离越短，对应的反应能垒越高。其次，初始态(IS)和 TS 结构之间的 d 带中心的差值越小，对应的反应能垒就越低。最后，催化体系对单独的 CO 和 O<sub>2</sub> 的吸附能也会影响催化效果。综上，缺陷 UiO-66 可以作为一种有前景的载体，用于制备 CO 氧化的双原子催化剂，我们的工作将为 MOF 材料在环境应用领域奠定一定的理论基础。

## 墙报题目：氮掺杂石墨炔-MXene 复合结构：高效的双功能电催化剂

作者：李雅楠 潘圆圆\*

中国石油大学（华东） *Li\_Yanan\_LYN@163.com*

### 摘要：

具有  $sp$  和  $sp^2$  杂化的氮原子掺杂石墨炔是一种非常有前景的氧化还原反应(ORR)和析氢反应(HER)的催化剂，将氮掺杂石墨炔与具有高电导率和快速电荷转移动力学的底物复合可以有效提高催化性能。本文采用第一性原理计算，设计了单层氮掺杂石墨炔和 MXenes(包括  $Ti_2C$ 、 $V_2C$  和  $Mo_2C$ )的异质结构，并研究其作为 ORR 和 HER 电催化剂的表现。结果表明，在  $V_2C$  和  $Mo_2C$  上，具有  $sp$  杂化氮原子掺杂的石墨炔表现出良好的 ORR 性能，其过电势可降至 0.44 V，HER 反应的自由能也都几乎为零，且都具有较低的动力学势垒，而在 MXenes 上具有石墨氮掺杂的单层石墨炔的催化弱于  $sp$  杂化氮原子掺杂的石墨炔。异质结构优异的催化性能源于 MXenes 调节了单层石墨炔的电子结构，以及氮原子的掺杂改变了表面碳原子的电荷密度。总的来说，负载在 MXenes 上的氮原子掺杂单层石墨炔是一类很有前景的 ORR 和 HER 反应的电催化剂。

**墙报题目：单层 SiAs 与金属界面性质的第一性原理研究**

**作者：丛瑶 潘圆圆\***

中国石油大学（华东） *yuanyuanpan@upc.edu.cn*

**摘要：**

随着电子器件尺寸到达亚 10 nm，传统的硅基半导体达到其器件性能极限，发展二维半导体材料是扩展电子器件尺度的有效途径之一。最新制备的单层 SiAs，由于具有合适的带隙，高的载流子迁移率，很强的各向异性，有望成为高性能电子器件的候选材料。本工作利用第一性原理电子结构计算和量子输运模拟，研究了单层 SiAs 与电极材料（Au、Ag、Cu、石墨烯）之间的界面接触性质。在垂直方向上，单层 SiAs 与 Au、Ag、Cu 接触存在明显的金属化效应，无肖特基势垒和隧穿势垒；与石墨烯形成范德华接触，存在肖特基势垒和可忽略的隧穿势垒。在水平方向上，单层 SiAs 与 Au、Ag、Cu 电极形成 n 型肖特基接触，肖特基势垒分别为 0.377 eV，0.278 eV，0.513 eV；与石墨烯形成 p 型肖特基接触其肖特基势垒为 0.647 eV。该研究不仅对单层 SiAs 与金属的接触界面性质有了深入的了解，而且对基于单层 SiAs 的晶体管设计也有一定的帮助。

**墙报题目：预测  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  单层在光催化方面的应用前景**

**作者：王佳宁 马风仙\***

**河北师范大学 [1368900536@qq.com](mailto:1368900536@qq.com)**

**摘要：**

最近，一种新型的二维层状材料  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  在实验中被成功制备出来。受实验的启发，基于密度泛函理论（DFT），我们进行了第一性原理的计算，系统地研究了  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  单层的结构、电子、光学、以及光催化方面的性质。我们发现  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  单层是一种间接带隙半导体，具有较大的带隙 2.48eV（HSE06 的结果），预计可以作为光学器件的备选材料。通过声子输运性质的计算证明了  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  单层结构的动力学稳定性。通过对光吸收谱线的研究发现  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  单层面内偏振的第一个吸收峰位于可见光范围内，表明它是一种很有前途的光电器件的候选材料。光催化方面的研究表明  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  单层是一种很好的光催化剂，它的带边位置与水的氧化电位、还原电位完美匹配，可以用于水分解成氢气。总之， $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  单层具有独特的物理性质，是一种很有前途的二维层状材料。



**墙报题目： Interlayer exciton properties of  
MoSSe/WSSe heterostructure**

**作者： 庞荣天 王舒东\***

内蒙古大学 *pangrongtian@aliyun.com*

**摘要：**

Heterostructure composed of two-dimensional (2D) transition metal dichalcogenides (TMDCs) are highly anticipated in ultrafast charge transfer, interlayer energy transfer and valleytronic applications, resulting from this family of materials have spatially separated electron-hole pairs, what is referred to as interlayer excitons (IX). Different from traditional TMDCs 2D materials, the 2D Janus material composed of TMDCs has some unusual properties in the part of its absorption spectrum controlled by indirect excitons due to the out-of-plane inherent dipole moment and the broken mirror symmetry produced by the different chemical components on both sides which has inspired many people to explore methods for synthesizing its single-layer and multi-layer structure.

To explore the indirect exciton (e.g. interlayer or momentum indirect excitons) properties of the MoSSe/WSSe heterostructure stacked by Janus monolayer we apply the  $G_0W_0$  approximation and the BSE equation to investigate the light absorption and exciton distribution of three different stacking configurations under incident light in the in-plane and out-of-plane directions. Meanwhile, we considered the momentum-dependent absorption spectra and exciton band structure at 0 GPa, 2 GPa and 4 GPa.

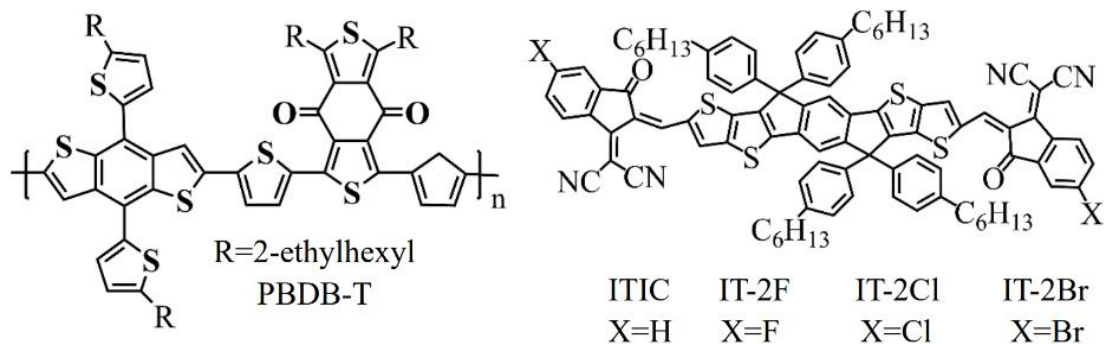
**墙报题目: The electronic structures and related properties of  
PBDB-T:IT-2X (X= H, F, Cl, Br) organic photovoltaic  
heterojunctions**

作者: 王宇 张材荣\*

兰州理工大学 2833664906@qq.com

摘要:

Molecular engineering plays a critical role in the development electron donor and acceptor materials with suitable physical properties for organic photovoltaics (OPVs). The halogenated acceptor materials in OPVs have shown high power conversion efficiency. Here, based on the density functional theory calculations considered the optimally tuned screened range-separated hybrid functional and the solid polarization effects, the halogenation effects of acceptors IT-2X (X=H, F, Cl, Br) and PBDB-T:IT-2X (X=H, F, Cl, Br) complexes on their geometries, electronic structures, excitation properties, electrostatic potentials, and the Marcus theory calculated rate constants of the photo-induced direct charge transfer (CT), exciton dissociation (ED), and charge recombination (CR) processes at the heterojunction interface. The results indicated that IT-2Br backbone has the best planarity which can promote electron delocalization and enhance intra-molecular CT characters. Meanwhile, chlorination and bromination of electron acceptors induce similar absorption spectra properties. Also, halogenation decrease the highest occupied molecular orbital and lowest unoccupied molecular orbital energies, which can affect the energy level arrangement at the OPV heterojunction interface, but also increase the average ESP difference on the electron donor and acceptor molecular surfaces, which is conducive to the formation of stronger intermolecular electric field and promotes the ED at the D/A interface. Halogenation increases the binding energy of the PBDB-T:IT-2X (X=F, Br) complexes which is favorable to improve the morphology regioregularity. Fluorination increases the CT excitation energy of the PBDB-T:IT-2F complex, which is beneficial to improve the open circuit voltage. Furthermore, acceptor halogenations affect the performances of the OPV devices by impacting on the CT, ED, CR rates. This work provides a theoretical understanding of the halogenation end groups for A-D-A-type non-fullerene acceptor for OPV.



**墙报题目：CdS/WS<sub>2</sub> 异质结带阶和电子结构的第一性原理研究**

**作者：王梦霞 程开\***

西安邮电大学 1733290348@qq.com

**摘要：**

能源一直处于社会的最前沿，净能源因其可再生、环境友好、可回收和经济的特性而受到青睐。氢气是清洁能源之一，而光催化水解是一种利用太阳能生产氢气的经济而环保的方法，因此不同国家的研究人员将光催化制氢作为解决能源和环境问题的最佳途径。CdS 材料因其在电子工业中的特殊性能和在电子器件领域的巨大应用潜力而成为近年来研究的热点。它是一种特别有前途的强水解光催化剂，因其高效、经济、导带位置合适等优点而备受关注。然而，由于 CdS 的固有缺陷，实验测得的制氢效率一直很低，常常导致激发态电子和空穴的交叉矢量络合，限制了其实际应用。CdS/WS<sub>2</sub> 是一种高效的复合催化剂，然而 WS<sub>2</sub> 提高 CdS 催化效率的物理机制尚不清晰，相关实验结果也由于表面/界面结构的差别而存在争议。本文拟开展第一性原理计算，研究不同取向 CdS/WS<sub>2</sub> 的电子结构，分析极性和非极性界面带阶，揭示其对界面取向的依赖关系以及光激发载流子在不同界面的迁移方向。通过模拟在 CdS/WS<sub>2</sub> 复合结构，探究异质结的能带结构和带阶，确定光激发载流子在界面处的迁移方向，从而为实验工作提供理论指导。

## 墙报题目：二维多铁范德华异质结构的设计与性能调控

作者：段训凯 齐景山\*

江苏师范大学 2020191085@jsun.edu.cn

### 摘要：

多铁性材料中铁电序和磁序之间的耦合对于基础科学和技术应用都具有重要意义。然而，发现和设计具有大极化和磁电耦合的二维多铁性材料一直是一个重大挑战。近几年，通过基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，我们课题组在铁电材料与多铁材料的物性研究与结构设计方面给出了几点新的思路，基于实验上可成功制备的二维铁电材料和铁磁材料，利用构造范德华异质结的方法，实现了有效的性能调控。我们通过将过渡金属酞菁分子(TMPC)与室温二维铁电材料  $\text{In}_2\text{Se}_3$  通过层间范德华力结合，提出了一种新的多铁性异质结构。我们发现，通过反转铁电极化方向，可以在  $\text{TMPC}/\text{In}_2\text{Se}_3$  (TM=Ti, Mn 和 Fe) 异质结中实现电场控制分子磁性。特别是在  $\text{TiPC}/\text{In}_2\text{Se}_3$  中，当铁电极化方向反向时，分子磁矩可以从 0 变为  $1.32\mu\text{B}$ ，表现出非常强的磁电耦合效应。这种强磁电耦合效应源于界面电荷转移和轨道分裂，导致  $\text{TMPC}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结构在两个相反的铁电相中具有不同的磁性态。我们提出了一种基于单层铁电材料  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  和单层  $\text{InSe}$  构造一类新的二维范德瓦尔斯异质结构  $\text{CuInP}_2\text{S}_6/\text{InSe}$  来实现磁控的策略。我们发现，在小的空穴掺杂浓度下，通过控制铁电  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  的极化方向可以实现不同的磁态。通过考虑载流子限制效应和斯通纳机制，可以很好地理解这种纯电控磁性的物理起源。我们通过将二维金属有机框架物 (MOF) 与二维铁电半导体  $\text{In}_2\text{Se}_3$  结合，提出了范德华异质结构  $\text{V}_2\text{C}_{18}\text{H}_{12}/\text{In}_2\text{Se}_3$ 。我们发现通过控制铁电极化方向可以在  $\text{V}_2\text{C}_{18}\text{H}_{12}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结构中实现反铁磁半导体-铁磁金属转变。 $\text{In}_2\text{Se}_3$  铁电极化态通过界面相互作用引起不同的电荷转移，从而使其呈现反铁磁半导体性或铁磁金属性。我们的工作不仅丰富了对铁电异质结构中铁电序和磁序耦合的理解，而且在探索非易失性铁电开关和存储器件方面具有巨大的应用潜力。

**墙报题目: Exciton states in Chiral Graphene Nanoribbons**

**作者: 王静 王舒东\***

内蒙古大学 *jingwangchn@163.com*

**摘要:**

Graphene nanostructures have characteristics related to width and edge structure. According to the edge structure, they can be divided into armchair, zigzag, and chiral graphene nanoribbons. Previous studies have shown the close relationship between the armchair band gap and its width, and the zigzag graphene nanoribbons have also proved their attractive properties related to the edge structure. Regarding chiral graphene nanoribbons, Mainly characterized by the translation vector  $(m,n)$  (3,1)-CGNRs, (4,1)-CGNRs and obo-dropped (4,1)-CGNRs have been successfully synthesized experimentally. First-principles methods are used to study the influence of different lattice translation vectors on the band gap, optical absorption and exciton effect of chiral graphene nanoribbons.

**墙报题目: Fully Boron-Sheet-Based Field Effect Transistors  
from First- Principles: Inverse Design of Semiconducting Boron  
Sheets**

**作者: 张奕林 龚新高\***

复旦大学 *zhangyilin@fudan.edu.cn*

**摘要:**

High-performance two-dimensional (2D) field effect transistors (FETs) have a broad application prospect in future electronic devices. The lack of an ideal material system, however, hinders the breakthrough of 2D FETs. Recently, phase engineering offers a promising solution, but it requires both semiconducting and metallic phases of materials. Here we suggest borophenes as ideal systems for 2D FETs by theoretically searching semiconducting phases. Using multiobjective differential optimization algorithms implemented in the IM2ODE package and the first-principles calculations, we have successfully identified 16 new semiconducting borophenes. Among them, the B12-1 borophene is the most stable semiconducting phase, whose total energy is lower than any other known semiconducting borophenes. By considering not only the band alignments but also the lattice matches between semiconducting and metallic borophenes, we then have theoretically proposed several device models of fully boron-sheet-based 2D FETs. Our work provides beneficial ideas and attempts for discovering novel borophene-based 2D FETs.

**墙报题目: First-Principles Study on The Electron-Phonon Interaction And Transport Properties in Two-Dimensional BeP<sub>2</sub>C**

**作者: 乌云达来 赵国军\***

内蒙古大学 [904807759@qq.com](mailto:904807759@qq.com)

**摘要:**

In the photoelectric conversion process, some losses will occur such as the thermal phenomenon. This article predicts that the thermal phenomenon may reduce the photoelectric conversion efficiency, which means that part of the energy cannot be used effectively. Aiming at the thermal phenomenon, this paper studies a two-dimensional single-layer BeP<sub>2</sub>C material, which is characterized by a relatively long hot carrier relaxation time. This feature may increase the photoelectric conversion efficiency, thereby reducing the thermal phenomenon. The paper also predicts that extracting hot carriers can effectively reduce the loss of the energy. Studies have shown that the total electron-phonon scattering rate at the edge of the band gap is almost zero. After leaving the band gap, the total electron-phonon scattering rate begins to increase, reaching a maximum value at 3.0 eV. This is the opposite trend to the total hot carrier relaxation time. The total hot carrier relaxation time reaches a maximum value on the band gap side which is about 1500 fs. Studies have shown that the hot carrier extraction range at a temperature of 0 K is less than 465 nm. The hot carrier extraction range at temperatures of 300 K is shortened to within 300 nm.



**墙报题目: The structural, mechanical and optical properties of ternary mixed crystals  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  with zinc-blende structure by first-principle calculations**

作者: 毛宇 赵国军\*

内蒙古大学 00220304@163.com

**摘要:**

The III-V group semiconductor materials have attracted considerable attention due to its potential applications and manufacture of photonic, electronic and optoelectronic devices. As typical III-V semiconductors, GaAs, InAs and their ternary mixed crystals  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , which are widely used in diode lasers, thin films solar cells, blue and green light-emitting diode and high-electron-mobility-transistor. The structural, elastic and optical properties of the ternary mixed crystals (TMCs) zinc-blende  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  for the In-composition varying from 0.0 to 1.0 by step of 0.125 are calculated by first-principle. We have adopted supercell structures of the  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  in this work, and the results for the equilibrium lattice constants, the elastic constants and the optical properties such as real and imaginary parts of the dielectric function, absorption coefficient, reflectivity, refractive index, extinction coefficient, energy loss function and real component of optical conductivity are presented and discussed in detail. The results show that the lattice constants vary with the composition almost linearly following the Vegard's law. Elastic properties such as bulk modulus  $B$ , shear modulus  $G$  and Young's modulus  $E$  decreases monotonically and non-linearly with increasing the alloy composition  $x$ . TMCs  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  are anisotropic and mechanically stable. And GaAs may be a less compressible alloy. The static dielectric constant, the static reflectivity and the static refractive index of optical parameters increases with increasing of indium composition. The incorporation of indium composition of absorption spectra leads to the redshifts phenomenon of optical absorption edge and a strong absorption is appeared from near visible to UV range. For  $x=0.125$ , the energy loss function occurs a maximum value so-called plasmon frequency at 15.4 eV and there is intense optical conductivity at lower photon energy range.

**墙报题目: The electron-phonon interaction of Cs-based  
inorganic halide perovskites (CsSnBr<sub>3</sub>, CsSnCl<sub>3</sub>)**

**作者: 毛小青 王舒东\***

内蒙古大学 *1810227826@qq.com*

**摘要:**

Halide perovskites (HPs) has excellent properties such as high charge mobility balance, high absorption coefficient of electron and hole transport, directly adjustable band gap and long carrier diffusion length, which are also considered as a potential low-cost alternative to silicon-based photovoltaic power generation materials. Through density functional perturbation theory and maximally localized Wannier functions interpolation method, we investigated the electron-phonon (e-ph) scattering of Cs-based inorganic halide perovskites (CsSnBr<sub>3</sub>, CsSnCl<sub>3</sub>). We have discussed the e-ph scattering rate, hot carrier relaxation time and the mean free path. We found that the scattering rate are much smaller from the band edge than that at the valance band maximum and conduction band minimum. And the largest relaxation time of CsSnBr<sub>3</sub> is 7.3 fs at -0.6 eV. But about the other CsSnCl<sub>3</sub> inorganic halide perovskite, its largest relaxation time is only 4.1 fs at -0.4 eV.

**墙报题目: The electron-phonon interaction of LiAlTe<sub>2</sub>**

**作者: 刘春艳 王舒东\***

内蒙古大学 *1642868144@qq.com*

**摘要:**

Two-dimensional materials have attracted much attention because of their stable structure and excellent electronic properties. The electron-phonon scattering is an important factor affecting the intrinsic transport. The electron-phonon scattering rate of two-dimensional LiAlTe<sub>2</sub> is studied by first principles calculations and Wannier function interpolation method. The Boltzmann transport equation is used to compute the phonon limited carrier scattering rate at different temperatures. It is found that the scattering rates of optical and acoustic phonons increase with the increase of temperature. And the main scattering rate comes from the scattering of acoustic phonons. At the valence band maximum (VBM), the longitudinal acoustic phonon (LA) plays a major role in the scattering rate. Meanwhile, at the conduction band minimum (CBM), the scattering rates are dominated by the transverse acoustic phonon (ZA). At 150 K, the maximum relaxation time of hot holes is 72 fs and that of hot electrons is 230 fs. With the increase of temperature to 400 K, the relaxation time of hot carriers decreases to 16 fs and 43 fs, which is due to the increase of phonon occupation number and the increase of electron phonon scattering rate. At 150 K, We observe that the maximum of mean free path for hot holes reach up to 5 nm at -0.73 eV. However, the maximum of mean free path for hot electrons reach up to 32 nm at 0.3 eV. That is the best range to extract the hot holes and electrons. When the temperature rises to 400 K, the range is shortened by nearly

**墙报题目: Machine Learning Force Field Simulations of Carbon  
Systems Based on First-principle Calculations**

**作者: 李洁 李锋钰\***

内蒙古大学 *jieli1411@163.com*

**摘要:**

Based on the first-principle calculations of the machine learning force field (ML-FF), we have developed a simulation method that can analyze and predict energies and forces from DFT calculations. Therefore, molecular dynamics (MD) simulations use highly disordered and ordered carbon precursors (bulk, clusters, graphene, and graphenylene respectively) to train thousands of data sets. Assembling these structures together has become very challenging. In this work, we used three different methods, namely linear regression (LR), neural network (NN) and VV, to fit the MD results corresponding to DFT, and analyze the corresponding energies and forces. It is concluded that the use of NN models is better than other models. As a result, the main results provide certain theoretical guidance for the selection of machine learning models for different systems.

**墙报题目: Machine learning force field simulations of sulfur  
systems based on first-principles calculations**

**作者: 韩婷 李锋钰\***

内蒙古大学 *1105453224@qq.com*

**摘要:**

Recently, it was demonstrated that machine learning (ML) algorithms displays accuracies close to the trained ab-Initio calculations, but are much faster to compute. Therefore, it has ever-increasing focus as a tool to generate force fields. Various methods have been used to implement ML simulations with a high order of accuracy of ab initio density functional theory in molecular dynamics by effectively simulating the energy or atomic forces of the system with structural information. In this work, we use a machine learning approach to extract the energy decomposition of atomic energy from DFT calculations. Taking sulfur atoms as an example, selects appropriate input features representation to represent the environment around each sulfur atom, and adopts linear regression and neural network machine learning model. The two models are trained to predict the difference in the resultant forces obtained by the DFT and the classical force field. For the simulated sulfur system, linear fitting potential is better than the neural network potential, and they are both in perfect agreement with the potential curve of DFT. The force fields of these two models will be used for molecular dynamics simulations of different system sizes and time scales.

## 墙报题目：过渡金属原子负载在 MoSe<sub>2</sub> 纳米片作为高效催化剂 的理论研究

作者：秦增明 赵景祥\*

哈尔滨师范大学 [qinzengming@163.com](mailto:qinzengming@163.com)

### 摘要：

通能源危机和全球气候变暖是当今世界面临的两大严峻问题。电催化氧还原反应（ORR）和析氧反应（OER）是解决上述两个问题的有效方法。因此，开发高效率、低成本和高选择性的电催化剂受到了研究者的广泛关注。我们以 MoSe<sub>2</sub> 纳米片为载体，负载不同过渡金属单原子作为催化剂，研究了该催化剂在促进 ORR 或 OER 过程的潜在应用。计算结果表明，过渡金属单原子负载在 1T-MoSe<sub>2</sub> 上比负载在 2H-MoSe<sub>2</sub> 上更稳定。然后考虑了二十种过渡金属分别负载在 1T-MoSe<sub>2</sub> 纳米片的稳定性，分别作为催化剂在电催化氧还原反应（ORR）和析氧反应（OER）的活性。计算结果显示，分别负载 Ni 和 Pd 的这两种催化剂表现出较高的 OER 活性，其过电位分别为 0.47 和 0.49 v。同时，Pd 原子负载在 1T-MoSe<sub>2</sub> 上也表现出优异的 ORR 性能，其过电位为 0.32 v。因此，这种负载 Pd 原子催化剂对 ORR/OER 具有优越的双功能活性。我们的研究结果为设计一类新的 MoSe<sub>2</sub> 催化剂提供了一条很有前途的方法，进一步丰富了 MoSe<sub>2</sub> 纳米片在催化领域的应用。

**墙报题目: Effect of Graphene and MoS<sub>2</sub> In-Plane  
Heterojunction Interface on Transport Properties**

作者: 宋顺 宫箭\*

内蒙古大学 [ndgong@imu.edu.cn](mailto:ndgong@imu.edu.cn)

**摘要:**

Using first-principles calculations, the influence of different interface on transport properties of graphene-MoS<sub>2</sub> in-plane heterojunction is systematically studied. After fully relaxed, eight stable heterostructures were obtained. The stable heterostructures can be divided into two categories: strain applied to graphene and strain applied to MoS<sub>2</sub>. All the stable in-plane heterostructures are n-type Schottky contacts. We find that the graphene-MoS<sub>2</sub> in-plane heterojunction device has good rectification performance. The maximum rectification ratio can reach 10<sup>5</sup>. We also find that the device with strain applied to graphene has better performance than the device with strain applied to MoS<sub>2</sub>. The device performance of graphene with S atomic layer contact is better than that of graphene with Mo atomic layer contact.



**墙报题目: Intrinsic Spin Hall Conductivity Platform in Triply  
Degenerate Semimetal**

**作者: 邹争春 周攀\***

湘潭大学 [zzcbrsc@smail.xtu.edu.cn](mailto:zzcbrsc@smail.xtu.edu.cn)

**摘要:**

It is generally believed that conductivity platform can only exist in insulator with topological nontrivial bulk occupied states. Such rule exhibits in two dimensional quantum (anomalous) Hall effect, quantum spin Hall effect, and three dimensional topological insulator. In this work, we propose a spin Hall conductivity (SHC) platform in a kind of three dimensional metallic materials with triply degenerate points around the Fermi level. With the help of a four bands  $k \cdot p$  model, we prove that SHC platform can form between  $|3/2, \square 3/2\rangle$  and  $|1/2, \square 1/2\rangle$  states of metallic system. Our further ab initio calculations predict that a nearly ideal SHC platform exhibits in an experimentally synthesized TaN. The width of the SHC platform reaches up to 0.55 eV, hoping to work under high temperature. The electrical conductivity tensor of TaN indicates that its spin Hall angle reaches -0.62, which is larger than many previous reported materials and make it an excellent candidate for producing stable spin current.

## 墙报题目：SOFC 连接体合金表面初步氧化的分子动力学模拟

作者：张原硕 王维华\*

太原科技大学 [yuanshuozhangde@gmail.com](mailto:yuanshuozhangde@gmail.com)

### 摘要：

铁素体 Fe-Cr 合金是固体氧化物燃料电池(SOFC)中最重要的金属互连材料之一,其抗氧化性能对 SOFC 的运行至关重要。本工作采用基于 ReaxFF 反应势的分子动力学方法,模拟了 O 离子与铁素体 Fe-Cr 合金(001)表面的相互作用,系统地研究了不同入射动能(0.5 eV~10 eV)以及不同体系温度(300 K~1100 K)下入射 O 离子与 Fe-Cr 合金(001)表面的相互作用。结果表明,入射 O 离子与基底表面的相互作用主要包括吸附、反射和溅射,并且定量地表明,吸附是主要的相互作用,反射很少,溅射几乎可以忽略不计。通过进一步计算入射 O 离子在 Fe-Cr 合金(001)表面的吸附位置,发现它们主要占据合金顶部 Fe-Cr 混合层的 Fe 原子和 Cr 原子之间的四面体间隙位置,这揭示了 Fe 原子和 Cr 原子在形成氧化物间存在竞争关系,同时表层的 Cr 原子能有效地阻碍 Fe-O 化合物的生成。此外,通过计算与统计被吸附的 O 离子与周围所有表面原子之间的距离,进一步表明了,随着入射 O 离子动能的增加和温度的升高,更容易生成 Fe-O 化合物。通过对 Fe-Cr 合金(001)表面的氧化行为的分析,我们提出了提高 SOFC 中 Fe-Cr 合金抗氧化性能的建议。

## 墙报题目: Valley polarization properties in two-dimensional H-Tl<sub>2</sub>O/CrI<sub>3</sub> heterostructure

作者: 郭甲田 任俊峰\*

山东师范大学 1151826369@qq.com

摘要:

Valley polarization (VP) has been predicted in two-dimensional (2D) hexagonal structure with magnetic proximity. The H-Tl<sub>2</sub>O/CrI<sub>3</sub> van der Waals (vdW) heterostructure is theoretically proposed as a promising valleytronic material with the valuable VP and valley spin splitting (VSS). It displays the VP in both the conduction (14.95 meV) and valence band at two valleys, Especially, the VP can be reached to 14.95 meV at the conduction band. Moreover, a large VSS of 0.57 (0.58) eV at the K (K') points are shown in the conduction band. With the manipulation of the interlayer spacing and the in-plane biaxial strain, both the VP and the VSS for the H-Tl<sub>2</sub>O/CrI<sub>3</sub> heterostructure follow the short-range effects of interfacial orbital hybridization, thus perform a nearly linear relationship. The H-Tl<sub>2</sub>O/CrI<sub>3</sub> heterostructure provides the application prospects of nanodevices and theoretical effective support for further development of valleytronics.

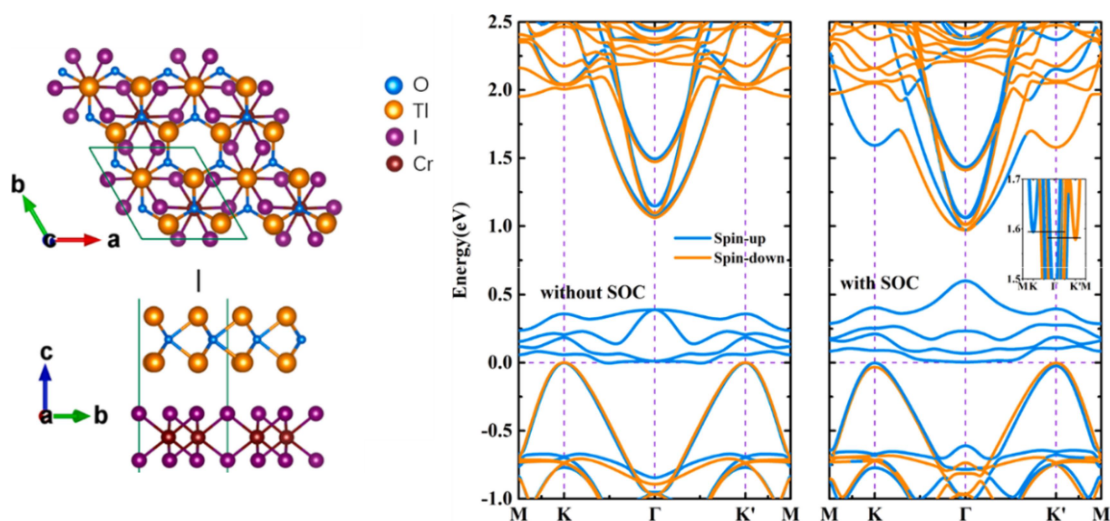


Fig.1. The structure of H-Tl<sub>2</sub>O/CrI<sub>3</sub> heterostructure, and the spin-projected band structure without SOC and with SOC of H-Tl<sub>2</sub>O/CrI<sub>3</sub> heterostructure.

**墙报题目： A comparative study of machine learning of force fields between neural network and linear regression models**

**作者：武佳妮 宫箭\***

内蒙古大学 *ndgong@imu.edu.cn*

**摘要：**

Machine learning force field (ML-FF) based one first principle calculations has a great potential to replace first principle calculations to study problems orders of magnitudes larger in both spatial and temporal scales. There are however different ML models, from the simple linear regression (LR) to more advanced neural network (NN). Obviously, the training time for LR is significantly faster than NN, so is the inferring time when these models are used for molecular dynamics (MD) simulations. It is thus interesting to know what are the benefits of NN over LR for different systems. To answer this question, we have carried out a systematic study, using Cu systems as examples. We found that, for systems close to equilibrium, e.g., the bulk Cu, the LR and NN almost give similar results, both are rather accurate. However, for far from equilibrium systems, the NN is more accurate than the LR model. Our comparison provide a guidance for what model one can use for different simulations.

## 墙报题目: WO<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> 混合材料薄膜的光伏储能效应

作者: 周欣蕊 杨笛\*

中央民族大学 [diyong@muc.edu.cn](mailto:diyong@muc.edu.cn)

### 摘要:

受益于光伏发电系统在材料合成、器件制备、装机和应用等方面的高度发展, 高效光伏电池板的成本已大幅度降低, 例如, 硅基太阳能电池板成本已下降至装机总成本的 30% 以下。光伏电池的高度发展使得太阳能技术迎来了新研究和发展契机, 即开发具有低成本、高效益、可持久连续工作的光伏-储能系统, 以解决光伏电池固有的间歇性电功率输出的问题。故此, 继承于光伏和储能两大技术发展历程的光伏储能器件应运而生。光伏储能器件兼备光电转化功能和电荷储存功能, 在光照下产生自由载流子并储存起来, 以实现连续供电。该器件是一种光伏-储能技术, 与光催化分解水制氢属于同源的姊妹技术。它一方面克服了光伏电池因受限于日照强度而造成的间歇性电功率输出的缺陷, 实现了昼夜连续稳定的工作; 另一方面在真正意义上实现了安全无线的自充电。

在光伏模块与储能模块集成的系统中 ( 简称为光伏储能器件), 染料敏化光伏电池在选材和结构设计上非常灵活, 易于和储能模块集成, 因此系的研究上有较大优势。然而作为新兴器件, 光伏储能器件的光发电输出效率普通较低, 这限制其实际应用。(注: 光发电输出效率的定义式为, solar-to-output electricity efficiency (SOEE) =  $\frac{E_{electrical,out}}{E_{illumination}}$ ;  $E_{electrical,out}$  为放电时的输出电功率,  $E_{illumination}$  为光充电时的入射光功率。) 通过我们组前期调研和评估发现, 如果将光生载流子直接用于防锈、杀菌、变色等用途, 而不是将其储存至储能器件中, 会大幅度降低多步中间损耗, 从而大幅度提高光生载流子的工作效率。2018 年希腊帕特雷大学 A. Dokouzis 等人在染料敏化光伏电池结构中集成了光致变色材料——WO<sub>3</sub> 薄膜, 染料敏化 TiO<sub>2</sub> 层在光照下产生的电子转移至 WO<sub>3</sub> 中, 使其颜色发生改变。实验表明, 光伏变色 ( 光伏器件与变色器件相集成的器件) 所需要的电压大约是同种变色材料采用电致变色所需要的电压的五分之一。可见光伏变色实现了大幅度的节能, 从而在建筑物玻璃, 汽车观后镜, 飞机窗户等方面具有更为广阔的应用前景。

在光伏变色器件、光伏防锈器件和光伏杀菌器件中, 器件的工作效率取决于光伏模块与多功能模块的相结合模式, 该结合模式工作机理和优化设计对于工作效率的提高至关重要, 因此在这方面的研究更能推动光伏储能器件的发展。然而, 对于工作机理的研究很少, 目前所报道的结果多集中在定性的分析, 缺乏在该方面的精确量化分析。在光伏变色器件中 WO<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> 混合材料薄膜是工作部分, 分析混合薄膜中载流子的产生、传输和储存对于变色效率和机理的研究非常重要的。

我们设计并制备了基于 WO<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> 混合材料薄膜的光伏储能器件, 并测试了 V-t 关系, IV 曲线, 阻抗谱和循环伏安特性等。以膜厚为变量, 分析这些特性与膜厚的关系。具体而言, 光照时电位随着混合材料薄膜厚度的增厚, 电势升高; 而经过照射后, 将样品置于黑暗中, 混合材料薄膜厚度越厚, 剩余电势越大, 这表明, 增大工作薄膜的厚度有利于光生电荷的储存。进一步缜密地分析 V-t 测试曲线发现, 混合材料薄膜越厚, 会造成光生电子的迁移率减小, 从而表现出光照电势减小; 而黑暗条件下, 储存电子浓度却随着膜厚增加而增大。由此可见, 光伏储存器件 SOEE 的提高依赖于工作层中自由电子产生、传输、储存这三种效应的综合考虑和优化设计。此外, 基于精确的测试数据, 我们对 WO<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> 光伏储能器件的机理进行了缜密的理论分析。

**墙报题目：二维碳硫材料作为钾离子电池的阳极材料**

**作者：唐孟 杨国春\***

东北师范大学 [yanggc468@nenu.edu.cn](mailto:yanggc468@nenu.edu.cn)

**摘要：**

由于钾在地球上的含量丰富和高的离子迁移率，钾离子电池(KIBs)已经成为有希望的储能装置之一。然而，由于钾大的离子半径，最成熟的石墨用做 KIBs 阳极时，只有低至 87 mAh/g 的容量。因此，寻找 KIBs 合适的阳极材料仍然是一个重大挑战。在这项工作中，我们通过第一性原理群智能结构搜索的方法，确定了几个无褶皱的碳硫单层。更有趣的是，它们作为 KIBs 阳极的理论容量相对较高。此外，金属碳硫单层可在电池循环期间提供良好的导电性。在实际应用中，较低的势垒能量和开路电压保证了良好的速率和安全性。这些优良的性能使碳硫单层成为一种很有前途的二维 KIBs 阳极材料。

**墙报题目：宽带隙 P-S 单层：具有各向异性和超高  
载流子迁移率**

**作者：王波 杨国春\***

东北师范大学 [wangb478@nenu.edu.cn](mailto:wangb478@nenu.edu.cn)

**摘要：**

具有宽带隙、各向异性和高载流子迁移率的二维材料对于先进光电器件的发展非常重要。然而，大多数二维半导体材料较低电子/空穴迁移率以及较窄的带隙，严重阻碍了其进一步发展。磷烯的各向异性和高载流子迁移率，为开发新的光电器件提供了额外的优势。然而，磷烯在空气中的不稳定性导致了器件性能的快速退化，限制了其实际应用。因此，在保持磷烯原有性质的同时提高磷烯的稳定性是非常重要的，而设计由非金属元素和磷(P)组成的二维材料是实现这一目标的有效策略。此外，众所周知，硫(S)和 P 可以形成共价化合物，而 S 掺杂黑磷(BP)对空气的抗氧化能力有所提高。因此，在本文中我们分析了二维 P-S 化合物的形成。在经过基于第一性原理的群智能计算的广泛结构搜索后，我们确定了两个稳定的单分子层。这些单分子层具有宽带隙、各向异性和超高载流子迁移率、高光吸收系数和高稳定性等有趣的特性。这些优良的性能使 P-S 单分子层在紫外光电器件中具有很好的应用前景。



**墙报题目: Strain Induced Ideal Topological Semimetal in  
Ort-B<sub>32</sub> with Parallel Arc-Like Nodal Lines and Anisotropic  
Multiple Weyl Fermions**

**作者: 韩圣茹 刘志锋\***

内蒙古大学 *srhanimu@163.com*

**摘要:**

Ideal topological semimetals, which are composed of non-toxic lightweight elements and host clean Dirac/Weyl fermions near the Fermi energy without contamination from other quasiparticles, are highly desirable for experimental detection and practical application. Herein, using first-principles calculations, we demonstrate that a new stable boron allotrope, termed ort-B<sub>32</sub>, can harbor the needed clean Weyl fermions in a sizable energy window under modest tensile strain. Owing to the protection of mirror symmetry, the Weyl points form two pair arc-like nodal lines, running across the whole Brillouin zone in the  $k_z = 0$  plane. The topological features of these nodal lines can be characterized by the drumhead-like surface state and nonzero topological invariant. Remarkably, the examination of slope index reveals that the type-I, type-II and type-III Weyl states can be found in different moment directions with the value of Fermi velocities ranging from 0 to  $11.5 \times 10^5$  m/s. These results establish a striking new boron allotrope, and highlight the mechanically induced method for obtaining ideal Weyl semimetal.

**墙报题目: Non-equilibrium Green's function formalism for magnon-phonon scattering in three-dimensional nanostructure**

**作者: 潘慧 陈克求\***

湖南大学 [panhui@hnu.edu.cn](mailto:panhui@hnu.edu.cn)

**摘要:**

Spin-phonon interaction has attracted to more attention due to the rapid progress in the field of spin caloritronics. The phonon-dragged magnon transport is one of the most critical mechanism of the long-range nature in spin seebeck effect. Here, we present the NEGF formalism for magnon-phonon coupled transport in three-dimensional ferromagnetic insulator and evaluate the phonon dragged effect in the monolayer CrI<sub>3</sub> under the tunling of temperature and external magnetic feild, which paves the way to the study of spin caloritronics nanodevice.

**墙报题目：通过量子干涉效应调控纳米体系输运行为**

**作者：丁中科 陈克求\***

湖南大学 *dingzhongke@hnu.edu.cn*

**摘要：**

相位作为当代物理学的主旋律之一，在量子体系的输运行为中有着不可忽视的作用。相位变化引起的不同类型的量子干涉效应是调控量子体系输运行为的重要手段之一。要通过量子干涉这一自由度来调控微观体系的输运性质，关键在于如何设计简单有效的调控手段。本海报就展示了我们在实现对量子干涉行为的调控上做出的一些努力。其中包括如下工作：①通过调节强耦合分子间的扭转角，可以有效操控操纵声子干涉，从而更精确地调节分子结的热导。②由于自旋分辨量子干涉的存在，可以通过改变分子长度来实现自旋可调滤波行为。③通过改变分子的对称性构型，研究了对称和反对称分子结中，在自旋依赖的量子干涉效应下，自旋注入效率和隧穿磁阻的变化特点。

**墙报题目: Methane Conversion on Metal Dimer Embedded  
Phthalocyanine Sheet: A Theoretical Study**

作者: 孟海红 李锋钰\*

内蒙古大学 *fengyuli@imu.edu.cn*

摘要:

First-principle theoretical study was performed to investigate the detailed reaction mechanism of methane conversion on 27 transition metals (M = Sc, Ti ...) from I B to group VIII B and 3 main group metals (M = Al, Ga, Bi) diatomic on phthalocyanine surfaces catalysts (M<sub>2</sub>-Pc). We have clarified the pathways of methane C-H bond activation assisted by surface oxygen and hydroxyl species (\*O- and \*OH-):  $CH_4 \square *O \square *CH_3 \square *OH$ ,  $CH_4 \square *OH \square *CH_3 \square H_2O$ , obtained by the decomposition of hydrogen peroxide:  $H_2O_2 \square *O \square H_2O$ ,  $H_2O_2 \square 2 *OH$ , We show that \*O- species has a promoting effect on the activation of the first C-H bond of CH<sub>4</sub>, and this promotion is related to the metal elements anchored on the Pc surface, while the \*OH- species has little effect. We also investigated the direct non-oxidative conversion of CH<sub>4</sub> on catalysts surfaces:  $CH_4 \square * \square *CH_3 \square *H$ . It is found that CH<sub>4</sub> on the surface of Ta<sub>2</sub>-Pc will be cleaved spontaneously, which can then convert CH<sub>4</sub> directly and non-oxidatively.

**墙报题目: First-principles study on the optoelectronic properties  
of Ga vacancy correlation point defects in GaN**

**作者: 王千颢 宫箭\***

内蒙古大学 [ndgong@imu.edu.cn](mailto:ndgong@imu.edu.cn)

**摘要:**

Point defects play an important role in the photoelectrical properties of semiconductor materials, and they can be luminescence centers. However, the relationships among the observed luminescence wavelengths, and the microscopic processes are in most cases unknown, or depend heavily on parameter fitting. In this work, the light-emitting quantum efficiencies for point defects using ab initio density functional theory are calculated. Based on first principles, HSE hybrid functional theory calculations, the defect transition energy levels and photoabsorption (PA) and photoluminescence (PL), a zero phonon line (ZPL) calculations of the related optical transition processes, we believe that the transition from  $(V_{\text{Ga-n}}V_{\text{N}})^+$  to  $(V_{\text{Ga-n}}V_{\text{N}})^0$  ( $n=1,2,3$ ) may be the cause of the experimental yellow light band. We calculated the phonon state density of the system, and found that the defects caused some new local phonon modes, and further simulated the local phonon vibration mode of the impurity peak. The impurity peak in the  $V_{\text{Ga-3H}}$  structure band gap mainly comes from the vibration of the neighboring nitrogen atom around the defect, while the high energy part mainly comes from the vibration of the H atom around the defect. The three impurity peaks in the  $V_{\text{Ga-VN}}$  structure band gap are mainly caused by the vibration of neighboring N atoms around the defect. We also calculated the non-radiative recombination rate and the hole capture cross section of the related process, and found that the capture cross section at 300K was in good agreement with the experimental results, which further proved that the defect of  $V_{\text{Ga-n}}V_{\text{N}}$  was the reason for the yellow luminescence band in the experiment.

## 墙报题目: Tuning the transport properties of $\alpha$ -GeTe by uniaxial strain engineering

作者: 王茹钰 宫箭\*

内蒙古大学 [ndgong@imu.edu.cn](mailto:ndgong@imu.edu.cn)

摘要:

Based on first-principle calculations, the electronic properties and device performance of two-dimensional monolayer  $\alpha$ -GeTe are systemically investigated. It is demonstrated that monolayer  $\alpha$ -GeTe owns an indirect band structure with the gap value of 1.75 eV, and monolayers  $\alpha$ -GeTe has a high electron mobilities, the electron mobilities are  $674 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  and  $902.3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  along x and y direction, respectively. Furthermore, the results of performance of the monolayer  $\alpha$ -GeTe Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect transistors with an 5 nm scaling channel length show that the on-state currents are 2216.1 mA/mm and 799.7 mA/mm along x and y direction, respectively. In addition, we also calculate the performance of  $\alpha$ -GeTe Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect effect transistors under the strain.

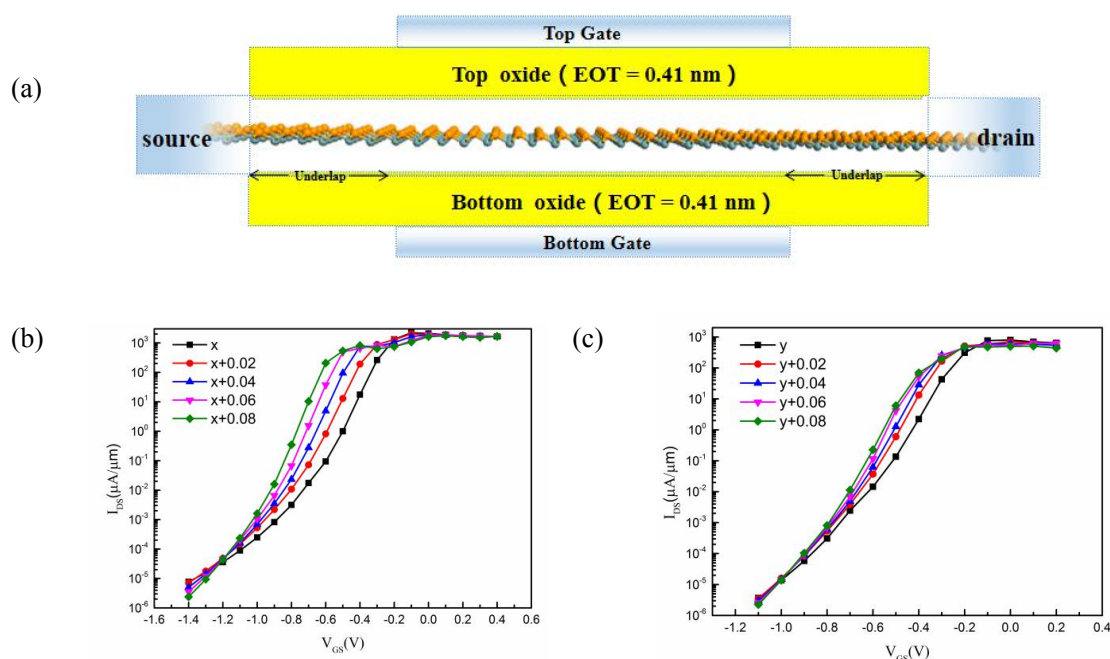


图 1. (a) Schematic view of the double-gate n-type MOSFETs, (b) The I-V curves of monolayers  $\alpha$ -GeTe for uniaxial armchair strain and (c) uniaxial armchair strain.



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](http://www.hxps.com.cn)