

第2分会 | 人工智能与理论计算分会日程表

分会负责人：穆骏驹、肖建平、周吉彬、王昱

董雪 15734121698 xdong@dicp.ac.cn

日期	报告时间		报告序号	报告人单位	报告人姓名	报告题目	主持人	
5月11日	8:30	12:00	大会报告					
	12:00-13:30 自助餐							
	13:30	14:00	KN-2-1	天津大学	赵志坚	烷烃脱氢催化剂的理性设计	杨波	
	14:00	14:15	IV-2-1	复旦大学	商城	LASP 软件的开发及其在催化材料结构预测中的应用	曹亮	
	14:15	14:30	IV-2-2	上海科技大学	杨波	催化反应-扩散系统的跨尺度动力学模拟：以分子筛催化为例		
	14:30	14:45	IV-2-3	复旦大学	李晔飞	机器学习方法在多相催化中的应用		
	14:45	14:55	OL-2-1	中国科学技术大学	王嵩	基于谱学描述符的催化性质智能预测与按需生成		
	14:55	15:05	OL-2-2	中国科学院大连化学物理研究所	龙军	Fundamental insights on the electrochemical nitrogen oxidation over metal oxides		
	15:05	15:15	茶歇					
	15:15	15:30	IV-2-4	浙江大学	曹亮	基于机器学习的合金纳米催化剂理性设计	商城	
	15:30	15:45	IV-2-5	西安交通大学	常春然	ZnGa ₂ O ₄ 催化二氧化碳加氢制甲醇机制研究		
	15:45	16:00	IV-2-6	澳大利亚阿德莱德大学	李昊博	AI-Driven Energy Catalysis: Make AI Do Your Work		
	16:00	16:10	OL-2-3	中国科学院上海有机化学研究所	马思聪	机器学习加速金属-膦配体催化剂设计		
	16:10	16:20	OL-2-4	中石化石油化工科学研究院有限公司	秦康	知识与数据融合的多尺度过程模型		
	16:20	16:30	OL-2-5	华东理工大学	王志强	ZnO(10-10)表面氢负物种的产生及应用		

16:30	16:40	OL-2-6	甬江实验室	温正慧	基于流动化学和智能化的光催化合成研究	
16:40-17:10 集中讨论 (话题讨论引导专家: 刘智攀, 江俊)						赵志坚
17:10	17:22	OL-2-7	华南理工大学	陈立宇	有序大/介孔 MOF 基催化剂的设计及电催化应用	马思聪
17:22	17:27	FL-2-1	北京化工大学	许昊翔	乙烯裂解馏分加氢、氧化催化剂的理性设计	
17:27	17:32	FL-2-2	大连海事大学, 中国科学院大连化学物理研究所	王文洋	基于混合核与滚动窗口相关向量机的甲醇制烯烃产率预测	
17:32	17:37	FL-2-3	中国科学院精密测量科学与技术 创新研究院	袁家敏	分子筛中长链烷烃扩散机制的理论研究	
17:37	17:42	FL-2-4	清华大学化学工程系	钱帅任	化学链合成氨催化剂的多尺度设计策略	
17:42	17:47	FL-2-5	北京化工大学, 中科合成油技术股份有限公司	靳容容	机器学习驱动充分采样方法研究 IIIA 族金属氧化物氢气活化及 CO ₂ 转化机理	
17:47	17:52	FL-2-6	北京化工大学	李丹阳	双原子催化剂上氧还原反应的三维火山关系: 高通量筛选以及实验验证	
18:00	20:00	晚宴				

日期	报告时间		报告序号	报告人单位	报告人姓名	报告题目	主持人
5月12日	8:30	10:00	大会报告				
	10:00	10:20	茶歇				
	10:20	10:50	KN-2-2	南方科技大学	王阳刚	反应条件下催化动态机制的探索	王涛
	10:50	11:05	IV-2-7	西湖大学	王涛	磁-催化效应的理论机制研究	王阳刚
	11:05	11:20	IV-2-8	中国科学技术大学	胡素磊	数据和模型交互启发的催化剂失活动力学标度和分级理论	
	11:20	11:35	IV-2-9	浙江大学	曹昂	磁性效应新理论驱动的合成氨催化剂设计	

11:35	11:45	OL-2-8	中国科学院大连 化学物理研究所	李欢	从电催化脱硝转向合成氨的必要性	
11:45-12:15 集中讨论 (话题讨论引导专家: 温晓东, 王海丰)						
12:15-13:30 自助餐						
13:30	14:00	KN-2-3	日本东北大学	李昊	A "Data-Theory-Methodology-Experiment" Framework to Realize Catalyst Design	张亮
14:00	14:15	IV-2-10	清华大学	张亮	多组分氢能源催化剂的理性设计	林森
14:15	14:30	IV-2-11	中国科学技术大 学	刘进 勋	Theoretical Modelling of Cluster Catalysis under Operando Conditions	
14:30	14:45	IV-2-12	中石化 (上海) 石油化工研究院 有限公司	王传 明	分子筛催化甲醇制烯烃: 从反应机理到构效 关系	
14:45	14:55	OL-2-9	中科合成油技术 股份有限公司	任鹏 举	无序表面活性中心的理论方法和应用	
14:55	15:05	OL-2-10	华东理工大学	陈建 富	基于智能算法与第一性原理计算的表面重 构/相变机理研究	
15:05	15:15	茶歇				
15:15	15:30	IV-2-13	福州大学	林森	单原子合金表面的氢溢流动力学	刘进勋
15:30	15:45	IV-2-14	上海交通大学	曹宵 鸣	反应条件下分子筛限域纳米金属颗粒动态 催化过程	
15:45	16:00	IV-2-15	华东理工大学	吴新 平	能级校正的嵌入簇方法及其应用	
16:00	16:10	OL-2-11	南开大学	刘锦 程	电势影响下的单原子催化剂电子结构研究	
16:10	16:20	OL-2-12	中国科学院上海 高等研究院	朱倍 恩	高配位还是低配位: Pt 催化 CO 氧化活性的 原位动态认识	
16:20	16:30	OL-2-13	华东理工大学	王栋	自由基真实参与的光催化氧化图像	
16:30	16:40	OL-2-14	华东理工大学	来壮 壮	催化活性的理论特征描述牵引多相催化材 料筛选/设计	
16:40-17:10 集中讨论 (话题讨论引导专家: 李隽, 徐昕)						李昊

	17:10	17:15	FL-2-7	厦门大学	秦瑞轩	活性氢表面活性反应	刘锦程
	17:15	17:20	FL-2-8	合肥工业大学	张琪	配位环境调控的非均相金属络合物电催化性能理论研究	
	17:20	17:25	FL-2-9	华东理工大学	周敏	光电催化转化机理研究	
	17:25	17:30	FL-2-10	东北师范大学	朱常岩	电催化尿素生成的机制探索	
	17:30	17:35	FL-2-11	天津大学	肖田田	解耦 DMO 选择性加氢铜基催化剂活性中心的几何和电子效应	
	17:35	17:40	FL-2-12	浙江大学能源工程学院	付战照	表面含氧物种对于电催化 CO ₂ 还原的内在促进机制	
	17:40	17:45	FL-2-13	中国科学院大连化学物理研究所	孙晓缘	基于 p-band 中心的氧化物表面反应性描述符研究	
	17:45	17:50	FL-2-14	北京化工大学	王甲一	不饱和烃选择性加氢合金催化剂的理论设计	
	17:50	19:30	晚餐				

日期	报告时间		报告序号	报告人单位	报告人姓名	报告题目	主持人
5月13日	8:30	10:00	大会报告				
	10:00	10:20	茶歇				
	10:20	10:50	KN-2-4	清华大学	肖海	Potential-dependences in Electrocatalysis	程涛
	10:50	11:05	IV-2-16	苏州大学	程涛	电池界面的工况原子模拟	肖海
	11:05	11:20	IV-2-17	南京理工大学	湛诚	电催化中的位点结构与电子态演化的理论研究	
	11:20	11:35	IV-2-18	武汉大学	凌崇益	CO ₂ 还原反应机理与描述符	
	11:35	11:45	OL-2-15	东南大学	练成	非平衡态电化学热力学模型发展及应用	
	11:45-12:15 集中讨论 (话题讨论引导专家: 程俊, 李亚飞)						

12:15-13:30 自助餐						
13:30	13:50	IV-2-19	武汉大学	顾向奎	NO _x 电还原机理和催化剂设计	于良
13:50	14:10	IV-2-20	北京理工大学	谢静	共价有机框架微环境调控促进 CO ₂ 还原的理论研究	
14:10	14:30	IV-2-21	杨满意	杨满意	表面动力学对非均相氨催化分解过程的影响	
14:30	14:42	OL-2-16	中国科学院兰州化学物理研究所	席永杰	MoS ₂ 负载的双原子/三原子催化剂用于生物质转化	
14:42	14:54	OL-2-17	哈尔滨师范大学	赵景祥	二维材料尿素电化学合成的理论研究	
14:54	15:06	OL-2-18	北京低碳清洁能源研究院	赵华博	ε-Fe ₂ C 表面费托合成反应机理研究	
15:06	15:18	OL-2-19	西北工业大学	任煜京	硝基芳烃选择加氢反应中高效碳基单原子催化剂的设计	顾向奎
15:18	15:30	OL-2-20	中国科学院大连化学物理研究所	顾青青	单原子配位环境调控及物种定量	
15:30	15:42	OL-2-21	江西理工大学	朱丽华	协同催化助力催化加氢及电催化	
15:42	15:54	OL-2-22	西北工业大学	曹月领	镶嵌型催化剂的设计合成及其水相加氢性能研究	
16:00	16:30	茶歇				
16:30	17:00	闭幕式				