Z. 材料模拟、计算与设计

分会主席：赵纪军、孙志梅、马琰铭、刘轶、李默、吕广宏

单元 Z1: 7 月 11 日上午
主持人: 孙淮，李有勇
地　点: 新闻发布厅

08:00-08:25　Z-01(Keynote)
Inverse Design and Computational Studies of Novel Solar Energy Materials
龚新高
复旦大学

08:25-08:40　Z-02(Invited)
功能导向的新材料设计
张立军
吉林大学

08:40-08:55　Z-03(Invited)
基于第一性原理的高通量材料模拟在能源材料设计中的应用
朱虹
上海交通大学密西根学院

08:55-09:10　Z-04(Invited)
计算材料学在锂离子电池研发中的应用
施思齐
上海大学

09:10-09:25　Z-05(Invited)
新型二维有机可见光催化剂的设计及其光催化性能研究
蒋雪[1]，王鹏[1]，赵纪军[1]
1.大连理工大学三束改性教育部重点实验室
2.大连理工大学物理与光电工程学院

09:25-09:40　Z-06(Invited)
CALYPSO 结构预测方法及其在材料结构设计上的应用
王彦超，马琰铭
吉林大学超硬材料国家重点实验室

09:40-09:50　Z-07
Inverse Design of Inorganic Electrides
Yunwei Zhang，Hui Wang，Yanchao Wang，Yanming Ma
State Key Laboratory of Superhard Materials，Jilin University

09:50-10:00　Z-08
$CuGaS_2$ 同一第 VA 元素的非补偿性共掺杂以实现中间带
韩苗苗，曾雉
1.中国科学院合肥物质科学研究院
2.中国科学技术大学

10:00-10:15　茶歇

10:15-10:40　Z-09(Keynote)
贝里相位与拓扑量子材料设计
姚裕贵
北京理工大学物理学院

10:40-10:55　Z-010(Invited)
拓扑半金属 Na_3Bi 的结构稳定、拓扑相变和超软变形
陈星秋
中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室

10:55-11:10　Z-11(Invited)
Adsorption and Reactivity of CO_2 coadsorbed with H_2O on Rutile (110) Surface
Li-Min Liu
Beijing Computational Science Research Center

11:10-11:20　Z-12
超化学计量钚氧化物形成机制的电子结构计算研究
敖冰云
表面物理与化学重点实验室

11:20-11:30　Z-13
α 铀的弹性、电子、光学以及热力学性质的第一性原理计算
任志勇[1]，罗超[2]
1.表面物理与化学重点实验室
2.中国工程物理研究院

11:30-11:40　Z-14
碳硅烯和石墨炔狄拉克锥能带结构成因：密度泛函和紧束缚近似理论研究
秦绪明[1]，刘轶[2]，迟宝倩[1]，李小武[1]
1.东北大学理学院材料物理与化学研究所
2.上海大学物理系和上海材料基因组工程研究院

11:40-11:50　Z-15

Tc-P 共掺杂单层 MoS_2 光电特性的第一性原理计算

范梦慧，谢泉

贵州大学大数据与信息工程学院

11:50-12:00　Z-16

ZrX(X=Ti, Hf, Sc)固溶体系力学性质的第一原理研究

黄孙超[1,2]，曾雉[1]

1.中国科学院固体物理研究所材料物理重点实验室

2.安徽大学物理与材料科学学院

单元 Z2: 7 月 11 日下午

主持人: 刘轶，刘利民

地　点: 新闻发布厅

14:00-14:25　Z-17(Keynote)

Using dispersion-corrected DFT to predict and interprete free energies of self-assembled mololayer formation from organic solvant

Jeffrey Reimers

Shanghai University Sydney Technology University

14:25-14:50　Z-18(Keynote)

材料基因组研究与“赝立方”类金刚石结构热电材料的设计

张文清

1.上海大学材料基因组工程研究院

2.高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室，中国科学院上海硅酸盐研究所

14:50-15:05　Z-19(Invited)

有机太阳能电池的形貌预测和效率预测

李有勇，杜春苗，纪玉金

苏州大学 功能纳米与软物质研究院

15:05-15:20　Z-20(Invited)

太阳能电池材料的缺陷物理研究

陈时友

华东师范大学 极化材料与器件教育部重点实验室

15:20-15:35　Z-21(Invited)

Catalytic Activity of WS_2, MoS_2 and VS_2 monolayer for Electrochemical Hydrogen Evolution

Xiaoli Fan[1]，Shiyao Wang[1]，Yurong An[1]，Woonming Lau[2]

1.State Key Laboratory of Solidification Processing，School of Material Science and Engineering，Northwestern Polytechnic University

2.Chengdu Green Energy and Green Manufacturing Technology R&D Center

15:35-15:50　Z-22(Invited)

锂空气电池的析氧反应界面催化机理研究与微观结构设计

刘建军

中国科学院上海硅酸盐研究所

15:50-16:05　Z-23(Invited)

固液界面预熔化及其在浸润与材料夹杂物领域中的应用

杨洋[1]，Brian B. Laird[2]，Mark Asta[3]

1.华东师范大学物理学系

2.University of Kansas，Department of Chemistry

3.University of California，Berkeley，Department of Materials Science and Engineering

16:05-16:20　茶歇

16:20-16:35　Z-24(Invited)

高性能合金的第一性原理研究

张华磊[1]，Levente Vitos[2]，Börje Johansson[2]

1.西安交通大学前沿科学技术研究院

2.瑞典皇家工学院

16:35-16:50　Z-25(Invited)

金属钨、钼、铁和钒中的杂质效应

刘悦林

烟台大学

16:50-17:05　Z-26(Invited)

Ni-Co 基高温合金的计算热力学及动力学研究

鲁晓刚

1.上海大学材料学院

2.上海大学材料基因组工程研究院

17:05-17:15　Z-27

新型锆合金设计及强韧化研究

张新宇，马明臻，刘日平

燕山大学亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室

17:15-17:25　Z-28

Nb-Si-Ti 超高温合金相图和相平衡研究

王金三

中国航空工业集团公司北京航空材料研究院

17:25-17:35　Z-29

Nb、Cu、Zr 掺杂对 NiTi 合金马氏体相变温度和热滞影响的第一性原理计算

杨小兰，马蕾，尚家香
北京航空航天大学材料科学与工程学院

17:35-17:45　Z-30
第一性原理分子动力学模拟研究 Mg95−xZnxCa5 非晶态合金的结构与电子性能和成分的关系
李舜宁，刘剑波，李家好，王江，柳百新
清华大学材料学院先进材料教育部重点实验室

17:45-17:55　Z-31
降低铝合金层错能的第一性原理研究
刘凌虹，陈江华，凡头文，张勇，袁定旺
湖南大学材料科学与工程学院，高分辨电镜中心

17:55-18:05　Z-32
金属镁层错能的第一性原理研究
丁志刚，李爽，刘伟，赵永好
南京理工大学材料科学与工程学院纳米结构材料中心

单元 Z3: 7 月 12 日下午
主持人: 陈星秋，张瑞丰
地　点: 新闻发布厅

14:00-14:15　Z-33(Invited)
Phase-field simulation of surfacial and volumetric defects in metallic glasses
Guangping Zheng
Department of Mechanical Engineering and Shenzhen Research Institute，Hong Kong Polytechnic University

14:15-14:30　Z-34(Invited)
Understanding glass formation from the atomic structure perspective in metallic glasses
Xiongjun Liu，Zhaoping Lu
State Key Lab for Advanced Metals & Materials，University of Science & Technology Beijing

14:30-14:40　Z-35
基于 ANSYS 的砂型铸造过程温度场和应力场的数值模拟
张文苹，张云鹏
西安理工大学材料科学与工学院

14:40-14:50　Z-36
Phase-field modeling of microstructure evolution during solidification with gas bubble nucleation and growth
Lifei Du，Lianli Wang，Bin Zheng
Xi'an University of Science and Technology

14:50-15:00　Z-37
TMS-113 镍基高温合金凝固、固溶及时效全过程微结构演变的实验测定及相场模拟
曹东甲，塔娜，张利军，杜勇
中南大学粉末冶金国家重点实验室，中德"微结构"联合实验室

15:00-15:10　Z-38
反相畴在 Ni-Al 体系中 γ′相演变过程中作用机制的相场研究
杨敏[1]，韦华[2]，张军[1]，金涛[2]，刘林[1]，孙晓峰[2]
1.西北工业大学凝固技术国家重点实验室
2.中国科学院金属研究所高温合金研究部

15:10-15:20　Z-39
六方小面向结构螺旋生长的界面各向异性、表面吸附以及动力学效应的相场法研究
董祥雷，邢辉，陈长乐，段培培，金克新
西北工业大学

15:20-15:30　Z-40
合金凝固高效率多晶定量相场模型及模拟
陈云，亓欣波，李殿中，康秀红
中国科学院金属研究所

15:30-15:40　Z-41
铝基非晶合金相关体系热力学和动力学研究
黄帅雄，刘立斌，章立钢，李显
中南大学

15:40-15:50　Z-42
应用 Peierls-Nabarro 模型研究纯镁中全位错对称倾侧小角度晶界
凡头文，陈江华，刘凌虹，袁定旺，张勇，伍翠兰
湖南大学材料科学与工程学院，高分辨电镜中心

15:50-16:00　Z-43
普碳钢奥氏体动态再结晶的元胞自动机模拟
马璇[1]，郑成武[2]，李殿中[2]，张兴国[1]
1.大连理工大学材料学院
2.中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家（联合）实验室

16:00-16:10　Z-44
高指数面 Pt 纳米粒子的结构稳定性、热稳定性以及结构演化
曾祥明，黄娆，邵桂芳，文玉华，孙世刚
厦门大学

16:10-16:20　Z-45
点缺陷在应变玻璃转变中的作用
王栋，王云志
西安交通大学

16:20-16:30　Z-46
多级增强陶瓷基复合材料微观结构模型与力学参数预测
栾坤
中国科学院上海硅酸盐研究所

16:30-18:00　茶歇，墙报交流

单元 Z4: 7 月 13 日上午
主持人: 龚新高，郑广平
地　点: 新闻发布厅

08:00-09:00
材料基因组专题讨论
王崇愚院士主持
清华大学

09:00-09:25　Z-47(Keynote)
Multi-scale Computer Simulations of Reactor Materials: Challenges and Opportunities
高飞
美国密歇根大学

09:25-09:40　Z-48(Invited)
核能材料理论研究的近期进展——从核燃料到核包壳
都时禹
中国科学院宁波材料技术与工程研究所

09:40-09:50　Z-49
金属钨中辐照点缺陷对晶界耦合运动的双重效应
牛亮亮[1]，张颖[1]，吕广宏[1]，高飞[2]
1.北京航空航天大学
2.密歇根大学安娜堡分校

09:50-10:00　Z-50
离子轰击作用对金属钛内氦泡破裂释放影响的分子动力学研究
梁力，马明旺，谈效华，向伟，王远，程焰林
中国工程物理研究院电子工程研究所

10:00-10:20　茶歇

10:20-10:35　Z-51(Invited)
界面位错形核的原子机理及冲击塑性的尺寸效应
张瑞丰
北京航空航天大学材料科学与工程学院

10:35-10:50　Z-52(Invited)
密排六方金属的塑性变形机制
郭雅芳，俎群，汤笑之
北京交通大学土建学院力学系

10:50-11:05　Z-53(Invited)
有限形变理论与非晶态合金力学性能的尺寸效应
汪浩
深圳大学纳米表面科学与工程研究所

11:05-11:20　Z-54(Invited)
应变速率诱导金刚石薄膜及 Cu 纳米线相变机制研究
谢红献
河北工业大学

11:20-11:30　Z-55
Ni 基单晶合金中迹量杂质元素对 Ni/Ni_3Al 相界的脆化作用及其相互影响
彭平
湖南大学

11:30-11:40　Z-56
密排六方单晶单轴压缩过程中的形变孪生
熊凯，张逸阳，顾剑锋
上海交通 大学材料科学与工程学院

11:40-11:50　Z-57
拉伸作用下 Ni/Ni_3Al 界面微孔洞扩展的分子动力学研究
商晶，李春
西北工业大学力学与土木建筑学院工程力学系

11:50-12:00　Z-58
紫铜合金压缩变形流变应力行为与预测
黄树海，陈强，夏祥生，舒大禹
西南工程技术研究所

单元 Z5: 7 月 13 日下午
主持人: 赵纪军，范晓丽
地　点: 新闻发布厅

14:00-14:25　Z-59(Keynote)
增强采样方法在模拟凝聚相反应中的研究

孙淮，程涛，辛亮，荆志峰，沈喆，向衍
上海交通大学化学化工学院

14:25-14:40　Z-60(Invited)
纳米药物传输系统的分子动力学研究
汪秀南[1]，张法达[1]，刘轶[2]，徐京城[1]，李生娟[1]
1.上海理工大学材料科学与工程学院
2.上海大学物理系和上海材料基因组工程研究院

14:40-14:50　Z-61
钨纳米团簇的分子动力学模拟
郝剑楠，张雪松，王琛浩，许珂，舒小林，吕广宏
北京航空航天大学物理科学与核能工程学院

14:50-15:00　Z-62
六角密堆金属钛中空位团簇化过程的原子尺度模拟
何燕[1,2]，周刚[1,3]，王皞[1]，徐东生[1]，杨锐[1]
1.中国科学院金属研究所
2.沈阳师范大学物理科学与技术学院
3.大连理工大学材料学院

15:00-15:15　茶歇

15:15-15:30　Z-63(Invited)
锌锰铁氧体中原子占位行为和性能的计算模拟
吴波[1]，陈祖华[1]，胡康明[1]，吴育锋[1]，郑福南[2]，黄锦涛[2]
1.福州大学
2.厦门 TDK 有限公司

15:30-15:45　Z-64(Invited)
非晶态材料的原子堆垛结构研究
孙永丽
太原理工大学

15:45-16:00　Z-65(Invited)
单相液固界面性质的分子动力学模拟
徐贲
清华大学

16:00-16:10　Z-66
HfC 表面性质的密度泛函计算以及 O 吸附对电子功函数的影响
王健[1]，王绍青[1]
1.中国科学院金属研究所
2.中国科技大学
3.辽宁科技大学

16:10-16:20　Z-67
HfC–SiC 氧化的热力学研究
李辉[1,2]，孙国栋[1]，张文雪[1]，许磊[1]，罗至利[1]
1.长安大学材料科学与工程学院
2.西北工业大学凝固技术国家重点实验室

16:20-16:30　Z-68
钢中夹杂物漂浮诱发通道偏析形成新机制：高分辨透射 X 射线三维表征和多相流数值模拟
曹艳飞，陈云，李殿中
中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家（联合）实验室

16:30-16:40　Z-69
考虑液相自然对流和枝晶运动的合金凝固过程的相场模拟
亓欣波，陈云，李殿中
中国科学院金属研究所

16:40-16:50　Z-70
Phase Separation and Crystallization Behaviors of Fluorosilicate Glasses: How to Grow Fluoride Nano-crystals from Fluorosilicate Glass Matrices?
Xusheng Qiao[1], Junjie Zhao[1], Ronghua Ma[1], Jun Gao[1], Jincheng Du[2], Xianping Fan[1]
1.State Key Laboratory of Silicon Materials,School of Materials Science and Engineering , Zhejiang University
2.Department of Materials Science and Engineering, University of North Texas，U.S.

16:50-17:00　Z-71
First-principles study of oxygen adsorption and diffusion on gama-TiAl(110) surface
Yang Jiao[1], Yan Song[2], Jianhong Dai[2], Lujun Huang[1], Lin Geng[1]
1.School of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology
2.School of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology at Weihai

17:00-17:10　Z-72
Ni, Cr, Mn 对 Si 和 Al 在 Fe/Cr_2O_3 界面偏聚行为的影响：第一性原理研究
董楠[1]，张彩丽[1]，刘慧[1]，王剑[1]，韩培德[1]
1.太原理工大学材料科学与工程学院
2.新材料界面科学与工程教育部重点实验室

17:10-17:20 Z-73

基于第一性原理对热障涂层中 NiPtAl 和 MCrAlY 粘结层表面氧化铝生长差异的研究

王逸群，宋鹏，季强，廖红星，陆建生
昆明理工大学材料科学与工程学院

17:20-17:30 Z-74

Growth morphology of $LaPO_4$ nanocrystals investigated from experiment and theoretical calculation

Xiaoyan Wang[1]，Zhongju Zhang[1]，Luo Zhang[2]，Xin Wang[2]
1.College of Chemistry and Chemical Engineering，Ocean University of China
2.Institute of Material Science and Engineering，Ocean University of China

17:30-17:40 Z-75

First-principles study of the Mg(0001)/Mg_2Si(111) interfacial properties

Yangfang Liao[1,2]，Quan Xie[1]
1.Guizhou University
2.Guizhou Normal University

17:40-17:50 Z-76

Al-Cu-Nd 三元系相关系测定与热力学优化

白卫民，谭明玥，许金宝，章立钢，刘立斌
中南大学材料科学与工程学院

17:50-18:00 Z-77

钨中自间隙原子团簇的迁移和转向-分子动力学研究

王金龙，牛亮亮，舒笑林，张颖
北京航空航天大学

墙展

Z-P01

Band structure and spin polarization of Heusler alloy $Co_2MnSi_{1-x}Z_x$ (Z=B, P, As):An ab initio calculation

康路
北京科技大学数理学院

Z-P02

磁性半金属 Mn2Z(Z=P，As，Sb，Bi)的第一性原理研究

高波
北京科技大学

Z-P03

几种六角金属晶格再取向的第一原理研究

周刚，王皞，徐东生，杨锐
中国科学院金属研究所

Z-P04

Fe 对 Al-Mg-Si-Cu 合金组织性能影响

蒙毅[1]，崔建忠[2]，朱远志[1]
1.北方工业大学
2.东北大学

Z-P05

第一性原理计算研究 SnO_2 (110)表面对 NO 的气敏机理

王小凤[2]，陈艳平[1]，裴金亮[1]，胡季帆[1]，秦宏伟[1]
1.山东大学物理学院
2.大连理工大学盘锦校区基础教学部

Z-P06

遗传算法结合第一性原理方法研究团簇结构

黄晓明[1]，梁晓庆[1]，赛琳伟[2]，赵纪军[1]
1.大连理工大学
2.河海大学常州校区

Z-P07

开发用以模拟电子激发态动力学的声子扰动法

汪日平，刘利民
北京计算科学研究中心

Z-P08

基于缺陷石墨烯的高灵敏度一氧化碳气体传感器：范德华力的交互作用

姜颖达，李爽，刘伟，赵永好
南京理工大学材料学院纳米结构材料中心

Z-P09

高熵合金 AlxCrMnFeCoNi 的弹性模量的第一性原理研究

孙逊，张华磊
西安交通大学前沿科学技术研究院

Z-P10

矿化剂对 Cr - Fe 系无钴黑色料合成影响的研究

梁翠玲
景德镇陶瓷学院

Z-P11

金属镍中间隙位错环强化的原子尺度模拟研究

王皞[1]，张悦[2]，于德军[2]
1.中国科学院金属研究所

2.鞍山师范大学

Z-P12

点缺陷引起的应力场在应变玻璃转变中的作用机制

梁传鑫，王栋，王昭，王云志
西安交通大学前沿院

Z-P13

晶体衍射的数值模拟

许珂，郝剑楠，舒小林，金硕
北京航空航天大学

Z-P14

Ni-W 二元体系的扩散行为研究

朱礼龙[1]，魏昌东[3]，江亮[1]，赵继成[3]，金展鹏[4]
1.中南大学 粉末冶金国家重点实验室
2.中南大学 粉末冶金研究院
3.Department of Materials Science and Engineering，The Ohio State University，USA
4.中南大学 材料科学与工程学院

Z-P15

剪切应变下磷烯的直接-间接带隙转变与各项异性降低的电子起源

萨百晟
福州大学

Z-P16

Mg-X-RE 系列镁合金典型长周期堆垛有序相结构建模及形成预测的第一原理研究

马尚义[1]，李建超[1]，刘利民[2]，王绍青[1]
1.中国科学院金属研究所
2.中国工程物理研究院北京计算科学研究中心

Z-P17

$Fe_2(MoO_4)_3$ 的制备与表征及其负膨胀性质的第一性原理研究

柴丰涛[1]，陈丽江[1]，施思齐[2]
1.浙江理工大学
2.上海大学

Z-P18

CO_2 capture and conversion

殷文金，刘利民
北京计算科学研究中心

Z-P19

Mg_2Si 和 Al_2CuMg 析出相与铝合金电化学腐蚀关联性的第一原理研究

覃一发，王绍青
中国科学院金属研究所,沈阳材料科学国家(联合)实验室

Z-P20

New Manifold Two-dimensional Single-layer Structure of Zinc-blende Compounds

童传佳，刘利民
北京计算科学研究中心

Z-P21

Two-dimensional square-pyramidal VO_2 with tunable electronic

唐振坤，刘利民
北京计算科学研究中心

Z-P22

第一性原理扶手椅型石墨烯/石墨烷(AGA/GNRs)异质结构纳米带的电学和磁学性能

张文雪，李涛
长安大学

Z-P23

铜锆界面能的第一原理研究

何成[1]，黄锐赟[1]，张文雪[2]
1.西安交通大学
2.长安大学

Z-P24

弯曲碳纳米管的结构和物理性质

刘立钊[1]，赵纪军[2]
1.大连理工大学盘锦校区 基础教学部
2.大连理工大学 三束材料改性教育部重点实验室

Z-P25

外延氧化石墨烯结构和稳定性的第一性原理研究

周思，赵纪军
大连理工大学

Z-P26

沸石表面离子吸附的密度泛函研究

刘一璠[1]，刘轶[2]，翟冬[3]，赵亮[3]，徐京城[1]，张晶[1]，罗德炳[1]
1.上海理工大学材料科学与工程学院
2.上海大学物理系和上海材料基因组工程研究院
3.中国石油大学（北京）重质油国家重点实验室

Z-P27

核聚变堆关键结构材料的第一性原理研究

赵纪军
大连理工大学三束材料改性教育部重点实验室

Z-P28

沸石酸处理中溶解和吸附过程的密度泛函研究

张晶[1]，刘轶[2]，翟冬[3]，赵亮[3]，徐京城[1]，
刘一璠[1]
1.上海理工大学材料科学与工程学院
2.上海大学物理系和上海材料基因组工程研究院
3.中国石油大学（北京）重质油国家重点实验室

Z-P29

飞机刹车虚拟仿真制动材料摩擦模型研究

陈梦樵，刘文胜，马运柱，刘根山
中南大学粉末冶金国家重点实验室

Z-P30

点阵式图案化存储交换耦合材料的微磁学模拟

仲子宜[1]，王子军[3]，吴平平[1]
1.厦门工学院 材料科学与工程系
2.厦门工学院 先进材料研究实验室
3.中国原子能科学研究院

Z-P31

Si_3N_4 高压相的结构预测及性能研究

崔琳，胡盟，王倩倩，何巨龙
亚稳材料科学与制备国家重点实验室，燕山大学

Z-P32

铝合金中的织构对裂纹尖端塑性影响的有限元模拟

刘冉，刘家菊，黄晖，王为，荣丽，聂祚仁
北京工业大学材料学院

Z-P33

镁合金 ECAP 成形过程有限元分析及工艺参数优化

彭必友，李文泽，夏怡文，陈世雄，潘仁元，
谢朵朵
西华大学

Z-P34

Cd 掺杂 ZnO 单层的电子结构及光学性质研究

谭昌龙[1]，徐殿双[1]，张琨[1]，田晓华[1]，蔡伟[2]
1.哈尔滨理工大学
2.哈尔滨工业大学

Z-P35

Ni-Mn-Sn 磁性形状记忆合金光学性质的第一性原理研究

谭昌龙[1]，张琨[1]，田晓华[1]，王振华[1]，蔡伟[2]
1.哈尔滨理工大学
2.哈尔滨工业大学

Z-P36

含氦泡的镍纳米丝拉伸特性研究

龚恒风，王呈斌，张伟，任翠兰，怀平，朱志远
1.中国科学院上海应用物理研究所
2.中国科学院微观界面与探测重点实验室

Z-P37

利用波尔兹曼-相场模型研究含流场的共晶生长

杨玉娟[1]，李俊杰[2]，王锦程[2]
1.同济大学机械与能源工程学院
2.西北工业大学凝固技术国家重点实验

Z-P38

铜团簇沉积在 Si(001)和 Si(111)衬底表面的理论模拟研究

龚恒风[1]，李公平[2]，吕炜[3]，王鲁闽[4]，张世旭[2]
1.中国科学院上海应用物理研究所-堆材料与工程技术部
2.兰州大学核科学与技术学院
3.密西根大学机械工程系
4.密西根大学核能工程与放射科学系

Z-P39

杂质的非局域和局域电化学效应对石墨烯化学活性的影响

巩朋来[1]，曾雉[1,2]
1.中国科学研合肥物质研究院固体物理研究所
2.中国科学技术大学

Z-P40

铝锂合金搅拌摩擦焊接数值模拟及实验研究

高恩志，尹治利，刘春忠
沈阳航空航天大学 材料科学与工程学院

Z-P41

ZrB2 高压相的第一性原理研究

凌飞飞，于栋利，黄权，高宇飞，罗坤
燕山大学

Z-P42

钛-钢复合板熔焊对接数值模拟

张敏，谢威威，樊庆仰，李继红
西安理工大学

Z-P43

樟脑磺酸掺杂聚苯胺系统的激发态氢键动力学理论研究

张亚红，段玉平，刘进
大连理工大学材料科学与工程学院

Z-P44

基于锻造的 AP1000 压水堆主管道 316LN 不锈钢材料数据库的建立与应用

王胜龙[1]，杨滨[1,2]，张铭显[1]，武焕春[1]
1.北京科技大学新金属材料国家重点实验室
2.北京科技大学钢铁共性技术协同创新中心

Z-P45

钛/钢复合板爆炸焊接数值模拟

张敏，刘娟娟，褚巧玲，蔡俊清，李继红
西安理工大学

Z-P46

超低碳贝氏体钢焊缝熔池微观组织的数值模拟

张敏，李露露，徐蔼彦，薛覃，李继红
西安理工大学

Z-P47

第一性原理方法研究 LiF 晶体的结构、声子和热力学性质

侯海军
1.盐城工学院材料工程学院
2.怀化学院物理与信息工程系
3.四川师范大学物理与信息工程学院

Z-P48

新型氮化铝亚稳结构及性能研究

刘超
燕山大学材料科学与工程学院

Z-P49

高压下 Al_3Ti 一维长周期结构相稳定性及弹性性能的研究

唐平英，黄国华，谢清连，黄津梨
广西高校新型电功能材料重点实验室,广西师范学院

Z-P50

钨中自间隙原子与空位的自修复机制

秦诗瑶，金硕，周洪波，张颖，吕广宏
北京航空航天大学，物理科学与核能工程学院

Z-P51

非金属掺杂锐钛矿型 TiO_2 的电子结构的研究

王园，王景州，马静，周剑平，陈晓明
陕西师范大学

Z-P52

第一性原理计算揭示 ABX_3 (A=CH_3NH_3，Cs; B=Sn，Pb; X=Cl，Br，I)系列材料带隙的本质

袁野[1]，徐闰[1]，徐海涛[1]，洪峰[1]，徐飞[1]，
王林军[1]，段纯刚[2]
1.上海大学材料学院
2.华东师范大学极化材料与器件教育部重点实验室

Z-P53

氧吸附诱导的 CoNi(111)合金表面成分偏聚的密度泛函理论研究

吁艳林，王立根，肖伟，黄国杰
北京有色金属研究总院

Z-P54

Adaptive cluster expansion approach for predicting the structure evolution of graphene oxide

Xi-Bo Li，Li-Min Liu
北京计算科学研究中心

Z-P55

基于流变学理论的 TRIP600 钢本构模型研究

孙蓟泉，牛闯，尹衍军，滕胜阳
北京科技大学冶金工程研究院

Z-P56

异质固-液界面中界面层横向结构的计算研究

梁洪涛[1]，Brian B.Laird[2]，杨洋[1]
1.华东师范大学物理学系
2.University of Kansas, Department of chemistry

Z-P57

液液界面本征结构的计算研究

杨洋[1]，Brian B. Laird[2]
1.华东师范大学物理学系
2.University of Kansas，Department of Chemistry

Z-P58

双量子点与拓扑超导纳米线混合结构中 Majorana 费米子的散粒噪声

刘亚梅，郭建宏
首都师范大学

Z-P59

钴纳米环阵列磁特性研究

叶晴莹，陈水源，陈书旸，宋铭霞，王婉芳，
刘劲尧，胡冰琳，黄志高
福建师范大学物理与能源学院，福建省量子调控与新能源材料重点实验室

Z-P60

第一性原理研究过渡金属中氢-氦的相互作用

张朋波[1]，赵纪军[2]
1.大连海事大学

2.大连理工大学

Z-P61

NiTi 合金表面稳定性的第一性原理研究

李永成[1]，王福合[1]，尚家香[2]
1.首都师范大学物理系
2.北京航空航天大学材料科学与工程学院

Z-P62

体心立方铁中晶界的自间隙原子发射机制

汤笑之，郭雅芳
北京交通大学土木建筑工程学院力学系

Z-P63

选择性轨道外加场法计算汞硫族化合物的能带结构及表面态性质

蔡佳
华东师范大学

Z-P64

钨中（110）扭转晶界能量与结构的分子静力学模拟

冯亚鑫，尚家香
北京航空航天大学材料学院

Z-P65

Fe、Si 成分比对 Fe_3Si 合金相组成的影响

马瑞
贵州大学

Z-P66

交换弹性 FePt/Fe 薄膜磁结构的微磁学模拟

王子军
中国原子能科学研究院

Z-P67

氧在 NiTi（110）表面吸附的第一性原理研究

李永成[1]，王福合[1]，尚家香[2]
1.首都师范大学物理系
2.北京航空航天大学材料科学与工程学院

Z-P68

相分离型熔体表征及分离过程研究

王丽，齐玉，王胜海
山东大学(威海) 机电与信息工程学院

Z-P69

SCM435 钢奥氏体区碳原子的扩散行为

徐东[1]，郑冰[1]，高新亮[2]，朱苗勇[3]
1.河北工程大学
2.燕山大学
3.东北大学

Z-P70

高功率 CO_2 激光焊接薄板接头组织性能与变形控制研究

何祖娟，陶海燕，王泽明，兰光友
中国核动力研究设计院第四研究所

Z-P71

第一性原理研究第三元素对铁在铜基体中溶解度的影响

王宇飞，高海燕，韩延峰，戴永兵，王俊，孙宝德
上海交通大学

Z-P72

含微量杂质元素硅的铝熔体结构研究

吕新雨，王俊，疏达，孙宝德
上海交通大学

Z-P73

Al-Zn-Mg-Cu 合金过饱和固溶体第二相粒子的析出动力学

刘园，李文君，蒋大鸣
哈尔滨工业大学 材料学院

Z-P74

热力学计算优化 A1-Zn-Mg-Cu 合金成分

刘园，蒋大鸣，李文君
哈尔滨工业大学 材料学院

Z-P75

氧化相析出形态对 Cu-Ni-M 合金抗氧化性能的影响

郑月红[1]，李晓娜[1,2]，张坤[1]，董闯[1,2]
1.大连理工大学材料科学与工程学院，三束材料改性教育部重点实验室
2.大连理工常州研究院有限公司

Z-P76

医用 Zr-Nb-Mo 合金单晶弹性常数的 CALPHAD 建模

梁佳思，王星，王芳，章立钢，刘立斌
湖南省长沙市中南大学材料科学与工程学院

Z-P77

Size dependent bond length of metallic clusters by considering bond number

Hui Li[1]，Shaoqi Chu[1]，Jia Wang[1]，Tianshu Zhu[2]，Haojie Xiao[1]，Haixia Zhang[1]，Ming Li[1]

1.Taiyuan University of Technology
2.Huaibei Normal University

Z-P78

固体与分子经验电子理论中键距差（BLD）法的改进

林成[1]，尹桂丽[1]，赵永庆[2]
1.辽宁工业大学
2.西北有色金属研究院

Z-P79

异质固-液界面台阶自由能的计算研究

梁洪涛[1]，Brian B.Laird[2]，杨洋[1]
1.华东师范大学物理学系
2.University of Kansas, Department of Chemistry

Z-P80

Ag(110) 表面上苯分子吸附结构和低频振动模的范德华密度泛函计算及非弹性隧道探测研究

袁定旺[1]，Zhumin[2]，Wilson Ho[2]，Ruqian Wu[2]
1.湖南大学，材料科学与工程学院
2.Department of Physics and Astronomy，University of California， USA

Z-P81

Tellurium Hydrides at High Pressures: High-temperature Superconductors

Xin Zhong
1.State Key Laboratory of Superhard Materials，Jilin University
2.Faculty of Chemistry，Northeast Normal University
3.College of Materials Science and Engineering，Jilin University

Z-P82

Thermodynamic calculations of the rare earth permanent magnets: Fe-RE binary systems

Taili Chen[1]，Jiang Wang[1]，Maohua Rong[1]，Guanghui Rao[1]，Huaiying Zhou[1]
1.School of Material Science and Engineering，Guilin University of Electronic Technology
2.Guangxi Key Laboratory of Information Materials，Guilin University of Electronic Technology

Z-P83

First-Principle Study of Lead Iodide Perovskite Tetragonal and Orthorhombic Phases for Photovoltaics

Wei Geng
Beijing Computational Science Research Center

Z-P84

First-Principles Study of Methanol Oxidation into Methyl Formate on Rutile TiO_2(110)

Bo Wen，Li-Min Liu
Beijing Computational Science Research Center

Z-P85

First-Principles Study of Lead Iodide Perovskite Tetragonal and Orthorhombic Phases for Photovoltaics

Wei Geng，Le Zhang，Yanning Zhang，Woon-ming lau，Limin Liu
北京计算科学研究中心

Z-P86

Electric field and Strain tunable band gap and carrier mobilities in the monolayer black phosphorous

Tengfei Cao
Beijing Computational Research Center

Z-P87

氮化硼纳米管吸附稀有气体原子第一性原理计算

温述龙[1]，黄整[2]，常红燕[2]，潘敏[1]，赵勇[1]
1.西南交通大学磁浮技术与磁浮列车教育部重点实验室，西南交通大学超导与新能源研究开发中心
2.西南交通大学物理科学与技术学院