

Z. 材料模拟、计算与设计

分会主席：赵纪军、刘利民、陈星秋、张妍宁、吕广宏

单元 Z-1: 7 月 11 日下午

主持人：王京阳, 宋晓艳

地点：6 馆-Z602

13:30-13:40 Z 分会开幕式

13:40-14:05 Z-01 (Keynote)

硬质合金强韧化的多尺度模拟研究

宋晓艳

北京工业大学

14:05-14:30 Z-02 (Keynote)

机器学习辅助新材料快速研发与多尺度计算

丁向东

西安交通大学

14:30-14:55 Z-03 (Keynote)

Oxide surfaces: improving the reliability of theoretical predictions based on experiments

于荣

清华大学

14:55-15:20 Z-04 (Keynote)

CALTPP: 一个计算热物性的通用程序

杜勇

中南大学

15:20-15:40 茶歇

16:40-16:05 Z-05 (Keynote)

聚变堆金属材料中子辐照多尺度模拟

吕广宏

北京航空航天大学

16:05-16:30 Z-06 (Keynote)

Abnormally strong electron-phonon scattering induced unprecedented reduction in lattice thermal conductivity of two-dimensional transition metal carbides

孙志梅

北京航空航天大学

16:30-16:55 Z-07 (Keynote)

多功能热障环境障涂层材料的设计与新原理探索

王京阳

中国科学院金属研究所

16:55-17:20 Z-08 (Keynote)

Strategy for Creating Low Sensitivity and Highly Energetic Materials through Crystal Engineering

张朝阳

中国工程物理研究院化工材料研究所

17:20-17:45 Z-09 (Keynote)

计算材料学与材料基因工程

杨明理

四川大学

单元 Z-2: 7 月 12 日上午

主持人：陈浩, 倪勇

地点：6 馆-Z602

08:30-08:50 Z-10 (Invited)

不同组织条件下钛合金变形机制的原子模拟

徐东生

中国科学院金属研究所

08:50-09:10 Z-11 (Invited)

薄膜结构中的多重应力不稳定性

倪勇

中国科学技术大学

09:10-09:30 Z-12 (Invited)

耦合相图计算方法和薄膜高通量实验应用于材料设计常可可

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

09:30-09:50 Z-13 (Invited)

集成计算材料工程在先进轻质金属合金中的示例研究

王毅

西北工业大学

09:50-10:00 Z-14 (Oral)

β -Nb 第二相尺寸与分布对锆合金氧化膜中应力影响的模拟研究

胡丽娟

上海大学

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

锆 δ 氢化物特殊堆垛结构的相场模拟

韩国民

中国工程物理研究院高性能数值模拟软件中心

10:10-10:25 茶歇

10:25-10:45 Z-16 (Invited)

Thermo-kinetic design of retained austenite in advanced high strength steels

陈浩

清华大学

10:45-11:05 Z-17 (Invited)

凝固形核过冷度精确测定及等轴晶初始生长动力学

陈云

中国科学院金属研究所

11:05-11:25 Z-18 (Invited)

Al 合金中共格 L12 纳米析出相的形成热力学和热稳定性

江勇

中南大学

11:25-11:35 Z-19 (Oral)

烧结合态硬质合金压缩过程中不均匀应变响应的模拟研究

李亚楠

北京工业大学

11:35-11:45 Z-20 (Oral)

反铁磁畴壁动力学研究

秦明辉

华南师范大学

11:45-11:55 Z-21 (Oral)

TensorAlloy: 高效的合金机器学习经验势建模程序

陈欣

中国工程物理研究院北京应用物理与计算数学研究所

11:55-12:05 Z-22 (Oral)

MnPS₃ 的压致自旋转变的研究

张汉星

中国科学院固体物理研究所

单元 Z-3: 7 月 12 日上午

主持人：刘伟, 田维全

地点：6 馆-Z603

08:30-08:50 Z-23 (Invited)

基于态求和的低维碳纳米材料二维非线性光学性质研究

田维全

重庆大学

- 08:50-09:10 Z-24 (Invited)**
光致变色材料 YH_xO_y 的第一性原理研究
孙宜阳
中国科学院上海硅酸盐研究所
- 09:10-09:30 Z-25 (Invited)**
Theoretical prediction on saddle-point excitons in 2D chalcogenides
邹小龙
清华-伯克利深圳学院
- 09:30-09:50 Z-26 (Invited)**
基于非线性光学原子响应理论的材料计算设计
程曦月
中国科学院福建物质结构研究所
- 09:50-10:10 Z-27 (Invited)**
第一性原理计算在光转换材料构效关系研究中的应用
张俊英
北京航空航天大学
- 10:10-10:25 茶歇**
- 10:25-10:45 Z-28 (Invited)**
Contribution of van der Waals interactions to the design of novel electronic devices
刘伟
南京理工大学
- 10:45-11:05 Z-29 (Invited)**
钙钛矿电池激发态动力学
龙闰
北京师范大学
- 11:05-11:25 Z-30 (Invited)**
A real-space hybrid approach for electronic structure of transition and post-metal oxides
李元昌
北京理工大学
- 11:25-11:45 Z-31 (Invited)**
弱键作用下的电荷转移对二维材料电子性质及其物性的影响
唐黎明
湖南大学
- 11:45-11:55 Z-32 (Oral)**
3d 过渡金属离子在宽禁带化合物中的缺陷能级
屈冰雁
合肥工业大学
- 11:55-12:05 Z-33 (Oral)**
半导体基光催化剂中光生电荷分离传输的理论计算研究
刘太丰
河南大学
- 单元 Z-4: 7 月 12 日下午
主持人: 常可可, 王毅
地点: 6 馆-Z602
- 13:30-13:50 Z-34 (Invited)**
架构非晶合金模拟与实验的桥梁
管鹏飞
北京计算科学研究中心
- 13:50-14:10 Z-35 (Invited)**
纳米孪晶金刚石中的位错行为
温斌
燕山大学
- 14:10-14:30 Z-36 (Invited)**
界面位错的原子尺度模拟计算及理论分析
杨金波
中国科学院金属研究所
- 14:30-14:50 Z-37 (Invited)**
材料金属性/非金属性对其结构和表面摩擦力的影响
高旺
吉林大学
- 14:50-15:10 Z-38 (Invited)**
Ti-Mo-Nb 合金相稳定性及弹性性质的第一性原理研究
许莹
华北理工大学
- 15:10-15:30 Z-39 (Invited)**
晶界拉伸第一原理计算中团块区域尺寸影响
王昊
上海大学
- 15:30-15:40 Z-40 (Oral)**
第一原理研究 ω 相对 β -Ti 合金力学性能的影响
曹烁
中国科学院金属研究所
- 15:40-15:50 Z-41 (Oral)**
面心立方金属的交滑移机制
李克强
中国科学院金属研究所
- 15:50-16:05 Z-42 (Oral)**
高通量多尺度材料计算模拟方法的应用
李玮琨
源资信息科技(上海)有限公司
- 16:20-17:30 墙报**
主持人: 张妍宁
地点: 6 号馆
- 单元 Z-5: 7 月 12 日下午
主持人: 孙宜阳, 邹小龙
地点: 6 馆-Z603
- 13:30-13:50 Z-43 (Invited)**
双层二维 CrX_2 ($\text{X}=\text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 和 CrI_3 的层间磁耦合机制
季威
人民大学
- 13:50-14:10 Z-44 (Invited)**
铁电极化与半导体表面相互作用机制研究
舒大军
南京大学
- 14:10-14:30 Z-45 (Invited)**
Diversified Magnetoelectric Coupling in 2D Multiferroics
吴梦昊
华中科技大学
- 14:30-14:50 Z-46 (Invited)**
二维磁性材料的结构设计
周向锋
燕山大学
- 14:50-15:10 Z-47 (Invited)**
二维材料结构特性的第一性原理研究: 拉伸膨胀现象和铁弹特性
马衍东
山东大学
- 15:10-15:30 Z-48 (Invited)**
Computational Crystal Growth of Two-Dimensional Transition Metal Carbides and Nitrides
谢禹
吉林大学
- 15:30-15:40 Z-49 (Oral)**
第一性原理方法研究二维室温铁电材料
阴化冰
河南大学

15:40-15:50 Z-50 (Oral)
第一性原理调查 PbTe/SrTe 界面的电子结构和塞贝克系数
李静玉
河南大学

15:50-16:05 Z-51 (Oral)
如何高效利用高性能计算技术加速材料科研工作
陈磊
北京并行科技股份有限公司

16:20-17:30 墙报
主持人: 张妍宁
地点: 6 号馆

单元 Z-6: 7 月 13 日上午
主持人: 张瑞丰, 胡青苗
地点: 6 馆-Z602

主持人: 赵纪军
08:30-08:50 分会闭幕式暨优秀墙报颁奖仪式

08:50-09:10 Z-52 (Invited)
极端条件下使用的原子间相互作用势的构建及应用
邓辉球
湖南大学

09:10-09:30 Z-53 (Invited)
钛合金塑性变形各向异性与保载疲劳敏感性第一原理研究
胡青苗
中国科学院金属研究所

09:30-09:50 Z-54 (Invited)
新型聚变/裂变固溶合金体系研制
黄河
中国工程物理研究院材料研究所

09:50-10:10 Z-55 (Invited)
二氧化铈材料中极化子与氧空位缺陷的关键作用
孙璐
有研工程技术研究院有限公司

10:10-10:20 Z-56 (Oral)
体心立方金属铌中 $1/2\langle 111 \rangle$ 螺位错交互作用机理研究
夏子雅
中国科学院金属研究所

10:20-10:35 茶歇

10:35-10:55 Z-57 (Invited)
晶体/晶体和晶体/非晶异质界面塑性起源与调控
张瑞丰
北京航空航天大学

10:55-11:15 Z-58 (Invited)
奥氏体不锈钢及其氧化膜在高温水中界面反应行为的从头
计算分子动力学模拟
王海涛
中国科学院金属研究所

11:15-11:35 Z-59 (Invited)
镁合金塑性变形机制的分子动力学模拟研究
宋海洋
西安石油大学

11:35-11:55 Z-60 (Invited)
FeNiCr 纳米合金颗粒熔融行为的分子动力学模拟研究
李蓓
武汉理工大学

11:55-12:05 Z-61 (Oral)
氢在钨空位团簇中溶解和聚集行为研究
任庆远
北京航空航天大学

单元 Z-7: 7 月 13 日上午
主持人: 敖志敏, 尹利长
地点: 6 馆-Z603

08:30-08:50 分会闭幕式暨优秀墙报颁奖仪式
主持人: 赵纪军
地点: 6 馆-Z602

08:50-09:10 Z-62 (Invited)
纳米尺度材料热、电输运与热电转换机理及计算设计
陈克求
湖南大学

09:10-09:30 Z-63 (Invited)
Boron contained photo/electrocatalysts for CORR/NRR
based on the first-principles investigations
尹利长
中国科学院金属研究所

09:30-09:50 Z-64 (Invited)
非金属催化剂的计算设计
周思
大连理工大学

09:50-10:10 Z-65 (Invited)
通过反应相图合理设计氯化氢氧化催化剂
肖建平
中国科学院大连化学物理研究所

10:10-10:20 Z-66 (Oral)
铂单层/金属及碳化钨材料析氢反应的第一性原理计算及设计
李希波
暨南大学

10:20-10:35 茶歇

10:35-10:55 Z-67 (Invited)
DFT 计算研究活化过硫酸盐降解有机污染物机理
敖志敏
广东工业大学

10:55-11:15 Z-68 (Invited)
修饰二硫化钨提升其电催化性能的理论研究
王璐
苏州大学

11:15-11:35 Z-69 (Invited)
新型催化材料模拟: 单原子和范德华异质节
郭伟
北京理工大学

11:35-11:45 Z-70 (Oral)
钴卟啉化合物在乙腈-水混合溶剂中催化产氢反应的第一性
原理研究
陈金繁
中国工程物理研究院

11:45-11:55 Z-71 (Oral)
金属和合金电化学腐蚀行为的第一性原理计算研究
马会
中国科学院金属研究所

11:55-12:05 Z-72 (Oral)
双原子催化剂在固氮领域的兴起
陈志文
吉林大学

单元 Z-8: 7 月 13 日下午
主持人: 胡军, 敖冰云
地点: 6 馆-Z602

- 13:30-13:50 Z-73 (Invited)**
钢系材料结构和性质的电子结构研究进展
 敖冰云
 中国工程物理研究院材料研究所
- 13:50-14:10 Z-74 (Invited)**
Effective Coulomb interaction in actinides from linear response approach
 邱睿智
 中国工程物理研究院材料研究所
- 14:10-14:30 Z-75 (Invited)**
高压下新奇的氮化物
 刘寒雨
 吉林大学
- 14:30-14:50 Z-76 (Invited)**
量子材料掺杂的密度泛函理论研究
 刘奇航
 南方科技大学
- 14:50-15:10 Z-77 (Invited)**
High-pressure phases of boron arsenide with potential high thermal conductivity
 高国英
 燕山大学
- 15:10-15:30 Z-78 (Invited)**
Electronic structure of cerium based heavy-fermion compounds using DFT+DMFT approach
 卢海燕
 中国工程物理研究院材料研究所
- 15:30-15:45 茶歇**
- 15:45-16:05 Z-79 (Invited)**
二维拓扑绝缘体的理论设计
 胡军
 苏州大学
- 16:05-16:25 Z-80 (Invited)**
二维硼化物超导及三维超导体中的拓扑态
 王保田
 中国科学院高能物理研究所
- 16:25-16:45 Z-81 (Invited)**
磁性拓扑材料的第一性原理设计
 王锐
 重庆大学
- 16:45-16:55 Z-82 (Oral)**
基于众核处理器加速的千亿晶体硅原子的大规模高性能计算
 侯超峰
 中科院过程工程研究所
- 16:55-17:05 Z-83 (Oral)**
聚合物纳米复合材料断裂性能的分子动力学模拟研究
 高洋洋
 北京化工大学
- 17:05-17:15 Z-84 (Oral)**
钨中氦泡生长过程中自间隙原子的聚集与发射
 许珂
 北京航空航天大学
- 17:15-17:25 Z-85 (Oral)**
添加元素对 W-Cu 复合材料界面特征影响的计算研究
 盖逸冰
 北京工业大学
- 17:25-17:35 Z-86 (Oral)**
基于团簇加连接原子模型的第一性原理计算
 苑峻豪
 大连理工大学
- 17:35-17:45 Z-87 (Oral)**
B2 合金中超螺位错的核结构与运动行为研究
 闫婧欣
 中国科学院金属研究所
- 17:45-17:55 Z-88 (Oral)**
第一原理计算有限温度下“软”金属铝的弹性常数
 张海军
 中国科学院金属研究所
- 单元 Z-9: 7 月 13 日下午**
主持人: 吕劲, 杨国春
地点: 6 馆-Z603
- 13:30-13:50 Z-89 (Invited)**
基于 CALYPSO 结构预测的二维材料设计
 杨国春
 东北师范大学
- 13:50-14:10 Z-90 (Invited)**
原子层带隙材料中的电声耦合
 杨腾
 中国科学院金属研究所
- 14:10-14:30 Z-91 (Invited)**
磷烯单层的结构稳定性, 衬底选择与边界重构的理论研究
 高峻峰
 大连理工大学
- 14:30-14:50 Z-92 (Invited)**
二氧化钛的表面重构
 周如龙
 合肥工业大学
- 14:50-15:10 Z-93 (Invited)**
三磷化锗/过渡金属二硫化物异质结的结构与性质的第一性原理研究
 吴波
 福州大学
- 15:10-15:30 Z-94 (Invited)**
杂原子调控纳米碳材料催化性能的计算模拟
 李波
 中国科学院金属研究所
- 15:30-15:45 Z-95 (Oral)**
AI 增强材料设计平台介绍---Li 离子电池设计与评价
 郑宏
 北京泰科博思科技有限公司
- 15:45-16:00 茶歇**
- 16:00-16:20 Z-96 (Invited)**
低维器件模拟新进展
 吕劲
 北京大学
- 16:20-16:40 Z-97 (Invited)**
Boosting oxygen catalysis performance of the-state-of-art catalysts by multi-field modulation
 李佳
 清华大学深圳研究生院
- 16:40-17:00 Z-98 (Invited)**
金属纳米催化剂二氧化碳电还原活性位点的原子解析
 程涛
 苏州大学
- 17:00-17:20 Z-99 (Invited)**
二维异质结 aMXene/TMDC 的电子结构及其应用
 李白海
 电子科技大学

17:20-17:30 Z-100 (Oral)

第四主族二维材料分离氢同位素的研究

付文博

中国工程物理研究院

17:30-17:40 Z-101 (Oral)

二茂基过渡金属前驱体在铂纳米颗粒表面的选择性原子层沉积原理

文艳伟

华中科技大学

17:40-17:50 Z-102 (Oral)

第一原理计算研究石墨烯在金属表面上物理与化学混合吸附现象的微观机理

张欣

中国科学院金属研究所

17:50-18:00 Z-103 (Oral)

石墨烯生长过程中超稳碳团簇的理论研究

吴曦

清华-伯克利深圳学院

墙展

Z-P01

新型多孔 C_4N_4 纳米片用作锂硫电池锚固材料

李彤彤

西安交通大学

Z-P02

镁纳米线中晶格转向塑性行为的动力学特征

张慧识

北京交通大学

Z-P03

对分子机器进行机械观察的计算研究

赵艳玲

香港城市大学

Z-P04

余氏理论的发展现状及展望

林成

辽宁石油化工大学

Z-P05

掺杂诱导电荷局域分布调控 SiC/Ti 基复合材料界面结合和弹性性能

张廷搏

天津大学

Z-P06

萘纳米链状分子的电子结构与非线性光学性质的理论研究

马加英

重庆大学

Z-P07

各向异性应变和温度双重作用对于氢在钨中的溶解行为的影响

韩全福

北京航空航天大学

Z-P08

辐照影响单晶铁变形及相变行为的理论研究

史俊勤

西安稀有金属材料研究院有限公司

Z-P09

一种新型非线性光学材料的理论研究: 萘掺杂和 BN 掺杂的螺旋石墨烯纳米带

刘令

重庆大学

Z-P10

基于原子密度扫描的非晶合金空间异质性表征

李硕

西安交通大学

Z-P11

基于萘掺杂的 X 型和 Y 型石墨烯纳米片的非线性光学性质的研究

杨翠翠

重庆大学

Z-P12

萘缺陷调控石墨烯纳米片边缘态: 静态第一超极化率的研究

郑雪莲

重庆大学

Z-P13

螺旋型碲链构成的碲炔烯: 结构和传输性质

戚刘健

吉林大学

Z-P14

材料塑性描述符的高通量第一性原理计算技术

张世毫

北京航空航天大学

Z-P15

$TMOS_2$ (TM = Sc, Y, Ti, Zr 和 Hf) 力学性能及其各向异性的第一性原理计算

曲德艺

昆明理工大学

Z-P16

萘缺陷掺杂的碳碗和石墨烯纳米片的非线性光学性质研究

陈开春

重庆大学

Z-P17

密度泛函理论指导甲酸脱氢非均相催化剂的合理设计

周亦彤

吉林大学

Z-P18

基于相图热力学计算探索新型 MAX 相

陈雷雷

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

Z-P19

相场法对 AZ31 镁合金再结晶模拟中储能项构造和作用的研究

吴艳

武汉轻工大学

Z-P20

极端条件下含能材料的结构和振动响应研究

范俊宇

大连理工大学

Z-P21

Chemical Optimization towards Superior Electrocatalysis of Janus 1T-MoSX (X=O, Se, Te) for Hydrogen Evolution: Small Composition Tuning Makes Big Difference

郝宇

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

Z-P22

铼在钨晶界中偏析和聚集行为及其影响研究

张博

北京航空航天大学

Z-P23

共价三嗪框架材料的无定形微观空间结构研究

宋策
大连理工大学

Z-P24
锌在铝中的空位扩散行为第一性原理研究
孔壮壮
昆明理工大学

Z-P25
单原子掺杂的二维 InSe 材料：电化学 CO₂ 还原与 CO 检测
赵辰旭
吉林大学

Z-P26
表面修饰调控的二维氮化镓的结构、电子和光学性质：第一性原理研究
翟淑伟
北京航空航天大学

Z-P27
Ni-Co 合金纳米结构力学性能的分子动力学模拟
杨攀峰
兰州理工大学

Z-P28
理论筛选用于电催化氮还原的过渡金属单原子掺杂 MXene 基催化剂
李磊
电子科技大学

Z-P29
第一原理计算金属的广义层错能与位错滑移临界剪切应力
张雪纯
中国科学院金属研究所

Z-P30
高通量计算探索典型金属材料的力学强度及应变调制电学性质
魏博
北京航空航天大学

Z-P31
钙钛矿太阳能电池中的离子迁移对载流子运输的影响
朱天元
南京大学

Z-P32
TiAlN 涂层表面氧化物形成过程的第一原理分子动力学研究
郭芳宇
中南大学

Z-P33
非晶态叠氮化铜含能材料的第一性原理分子动力学模拟
徐玉佳
北京理工大学

Z-P34
取向效应对镁、铝和钛初始塑性变形机制的影响
马志超
北京交通大学

Z-P35
应力调控半导体表面支撑铈烯的量子自旋霍尔效应
郝夏敏
北京航空航天大学

Z-P36
单层 1T' 相 WTe₂ 由氧化引起的拓扑相变
杨佳丽
重庆大学

Z-P37
界面掺杂调控金属衬底支撑二维氧化物电子结构的第一性

原理研究
孟庆玲
北京航空航天大学

Z-P38
有机分子材料热电性能调控
伍丹
湖南大学

Z-P39
SiC 中五次孪晶的原子结构及其对物理性质的作用
江亦潇
中国科学院金属研究所

Z-P40
HCP/FCC 双相钛纳米柱力学行为与变形机制的分子动力学模拟研究
杨丹
兰州理工大学

Z-P41
氨冰的第一性原理研究
于雪克
大连理工大学

Z-P42
新型二维铁磁半导体 CrB₂ 的第一性原理研究
王燕遐
大连理工大学

Z-P43
一类拥有自旋-二色性-迁移率强各向异性的高 T_c 铁磁单层材料: MnNX 和 CrCX(X=Cl, Br, I; C=S, Se, Te)
周谐宇
中国人民大学

Z-P44
镍基高温合金置换能的第一性原理与机器学习研究
孙浚晔
上海大学

Z-P45
空位缺陷和 Mn 掺杂石墨烯吸附 H₂S 分子：第一性原理研究
贾晓彤
华北理工大学

Z-P46
柱面冲击载荷下铜的塑性变形原子模拟
唐芳
湖南大学

Z-P47
基于阻抗匹配的新型宽带声学超材料设计与相关应用的研究
贾潇
南方科技大学

Z-P48
基于过渡金属硫化物 MX₂ 范德瓦尔斯异质结中的谷极化强度的研究
黎前泽
湖南大学

Z-P49
不同温度下硅纳米线结构及其性质的原子尺度计算研究
赵丹丹
东北大学

Z-P50
铌合金中掺杂元素对氧扩散的影响
陈建辉
上海大学

- Z-P51**
棱柱型孔洞对单晶镁冲击塑性与相变的分子动力学模拟
简智永
湖南大学
- Z-P52**
 A_3B 型电子晶体: 拓扑狄拉克节线半金属材料
王磊
中国科学院金属研究所
- Z-P53**
液态 Cu 和 Zr 的 ReaxFF 反应力场开发及分子动力学模拟
黄海深
北京理工大学
- Z-P54**
双功能单原子催化模型材料的理论分析
徐静
中国科学院福建物质结构研究所
- Z-P55**
Ga, Ge 和 As 元素掺杂单层 SiC 的第一性原理研究
罗建华
兰州理工大学
- Z-P56**
堆垛方式调控双层 CrI_3 的层间磁序
王聪
中国人民大学
- Z-P57**
尖晶石吸附能的第一性原理与机器学习研究
李一航
上海大学
- Z-P58**
第一原理计算 α -Ti-Al 合金的广义层错能及位错性质
于慧
中国科学院金属研究所
- Z-P59**
不同厚度硅纳米薄膜结构及其性质的 DFTB+计算研究
李静
东北大学
- Z-P60**
石墨炔吸附在金属表面过程中化学键合问题的第一原理计算
孙胜辉
中国科学院金属研究所
- Z-P61**
石墨和六方氮化硼的表面与层间吸附研究
王朝阳
南京大学
- Z-P62**
基于 PdF_3 的体材料及其磁隧道结的设计计算研究: 多重线性自旋零能隙能带结构及完美的自旋传输特性
李汀洲
西南大学
- Z-P63**
缺陷调控 MoS_2/Au 界面电子性能的第一性原理研究
邱小倩
中南大学
- Z-P64**
Ag-Cu-Mg-Mn 合金关键三元系 FCC 相的扩散动力学研究
闵倩辉
中南大学
- Z-P65**
合金元素对 TiN 基耐磨涂层性能影响的第一原理研究
汪炯
中南大学
- Z-P66**
分子动力学模拟 γ -Fe 单晶的熔点、He 迁移、He 泡的演化和扩散行为
万磊
四川大学
- Z-P67**
层错诱发 α -钛孪晶台阶形成和孪晶生长机制
钱琦
中南大学
- Z-P68**
基于第一性原理研究非金属杂质对金属晶界能量和强度的影响
黄志锋
武汉理工大学
- Z-P69**
U-Fe 二元体系的结构预测及力学性质的研究
刘鸣凤
中国科学院金属研究所
- Z-P70**
钛合金 VAR 过程中工艺参数对宏观偏析行为的影响
吴京洋
西北工业大学
- Z-P71**
第一性原理研究 V-Mo-W 合金膜中氢的溶解和扩散性能
覃甲尧
桂林电子科技大学
- Z-P72**
Ti-Zn 化合物的弹性、各向异性和德拜温度
寿宏伟
昆明理工大学
- Z-P73**
二维层内异质结生长的自应力调控
周霖蔚
中国人民大学
- Z-P74**
高压环境下钒的势函数构建及其冲击熔化行为的原子模拟
李盼
湖南大学
- Z-P75**
 α -U 中裂变气体 Xe 与合金元素 Zr、Mo 和 W 相互作用的第一性原理研究
曹金利
中国科学院原子能科学研究院
- Z-P76**
磷烯基范德华异质结太阳能电池
李孝辉
清华大学深圳国际研究生院
- Z-P77**
通过孔径级别的三维结构模拟实现的材料设计
程利萍
德国 Math2Market GmbH
- Z-P78**
柱面冲击下单晶铜高压熔化的分子动力学模拟
陈莹
湖南大学

Z-P79

TiN 晶界和界面的结构和力学响应

张磊

西安交通大学

Z-P80

第一性原理研究 PbTiO₃/BiFeO₃ 铁电异质结中极化对磁性和电子结构的调控

孙伟

河南大学

Z-P81

不同温度下硅纳米线结构及其性质的原子尺度计算研究

赵丹丹

东北大学

Z-P82

B 掺杂对金刚石烯稳定性和带隙调控的研究

牛草萍

中国科学院固体物理研究所

Z-P83

探索高压下三元氢化物的高温超导性

梁笑傲

燕山大学

Z-P84

潜在的超硬材料 B₆N

孙荣鑫

燕山大学

Z-P85

BA_s 高压相及热导性质研究

王林妍

燕山大学

Z-P86

六方密堆钛中 (11-21) 孪晶界与氢相互作用

贾云平

中国工程物理研究院核物理与化学研究所