

Z.材料模拟、计算与设计

分会主席：赵纪军、刘利民、陈星秋、范晓丽、吕广宏

单元 Z-1: 7月13日下午

主持人：赵纪军，陈星秋

地点：会议中心 1D 会议室（一楼）

13:30-13:40 Z 分会开幕式

13:40-14:10 Z-01 (Keynote)

相图、相变及合金设计

杜勇

中南大学

14:10-14:40 Z-02 (Keynote)

铁弹材料畴界的动力学规律及多功能特性研究

丁向东

西安交通大学

14:40-15:10 Z-03 (Keynote)

Icosahedral medium-range order and its effect on relaxation dynamics in CuZr metallic glass-forming liquids

李茂枝

人民大学

15:10-15:40 茶歇

15:40-16:10 Z-04 (Keynote)

国家重大安全领域的温稠密物质特性研究

张平

中国工程物理研究院北京应用物理与计算数学研究所

16:10-16:40 Z-05 (Keynote)

Material informatics accelerates innovative design of environmental barrier coating candidates

王京阳

中科院金属研究所

16:40-17:10 Z-06 (Keynote)

Computational prediction of novel form of silicon structures

Duckyoung Kim

中国工程物理研究院高压科学研究中心

17:10-18:00 墙报展览

单元 Z-2: 7月14日上午

主持人：胡青苗，管鹏飞

地点：会议中心 1D 会议室（一楼）

08:30-08:50 Z-07 (Invited)

Short-range order in Metallic glasses: Enough or not?

管鹏飞

北京计算科学研究中心

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

具有微结构的非晶合金的塑性变形的多尺度模拟

郑广平

Hong Kong Polytechnic University

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

纳米孪晶金刚石中的位错行为

温斌

燕山大学

09:30-09:50 Z-10 (Invited)

Al_xCrMnFeCoNi (0 ≤ x ≤ 5)高熵合金的弹性性能的第一性原理研究

张华磊

西安交通大学

09:50-10:00 Z-11 (Oral)

基于最大熵模型的体心、面心和六角结构高熵合金的弹性

性质研究

郑淑敏

中国科学院金属研究所

10:00-10:10 Z-12 (Oral)

应变引起纯铁中马氏体相变的分子动力学模拟研究

欧小琴

中南大学粉末冶金研究院

10:10-10:20 Z-13 (Oral)

铁弹畴壁上的不可动缺陷：缺陷处的畴壁形核

贺晓梅

西安交通大学

10:20-10:40 茶歇

10:40-11:00 Z-14 (Invited)

钛合金微观组织及力学性质的第一原理研究

胡青苗

中国科学院金属研究所

11:00-11:20 Z-15 (Invited)

钛基合金微观变形机制

王峰

中国科学院金属研究所

11:20-11:40 Z-16 (Invited)

应力诱导面心立方和体心立方之间的新型相变机制

谢红献

河北工业大学

11:40-12:00 Z-17 (Invited)

密排六方金属中晶体再取向行为的分子动力学研究

郭雅芳

北京交通大学

12:00-12:10 Z-18 (Oral)

常压及高压下 Si-C 体系结构与性质的探索

梁笑微

燕山大学材料学院

12:10-12:20 Z-19 (Oral)

应用机器学习的力场探索碱金属的高压相变机制

赵龙

西安交通大学材料学院

12:20-12:30 Z-20 (Oral)

Ginzburg-Landau 理论研究形状记忆合金点缺陷掺杂效应

杨媛超

西安交通大学

12:30-13:30 Lunch

单元 Z-3: 7月14日上午

主持人：邹小龙，季威

地点：会议中心 1E 会议室（一楼）

08:30-08:50 Z-21 (Invited)

利用层间工程调控二维材料物理性质及新兴磁性二维材料预测

季威

中国人民大学

08:50-09:10 Z-22 (Invited)

Design of 2D Monolayers for Energy Conversion and Storage

潘暉

University of Macau

- 09:10-09:30 Z-23 (Invited)**
Electronic, magnetic and topological properties of two-dimensional transition metal carbides (MXenes): A first-principles study
 司晨
 北京航空航天大学
- 09:30-09:50 Z-24 (Invited)**
几种二维层状材料的电子结构、电声耦合及超导电性
 王保田
 中国科学院高能物理研究所
- 09:50-10:10 Z-25 (Invited)**
单层三磷化钨的可调磁性及其优异光吸收性能
 缪奶华
 北京航空航天大学
- 10:10-10:30 Z-26 (Invited)**
电场调控下的双层 InSe 及其在数据存储中的应用
 萨百晟
 福州大学
- 10:30-10:50 茶歇**
- 10:50-11:10 Z-27 (Invited)**
Elemental and electronic chemical potentials controlled migration of dislocations in 2D transition metal dichalcogenides
 邹小龙
 清华-伯克利深圳学院
- 11:10-11:30 Z-28 (Invited)**
新型二维材料的预测与设计
 管杰
 东南大学
- 11:30-11:50 Z-29 (Invited)**
二维硒化锗体系的材料设计
 毛宇亮
 湘潭大学
- 11:50-12:10 Z-30 (Invited)**
Universal descriptor for large-scale screening of high performance two-dimensional materials for energy storage and conversion
 李佳
 清华大学深圳研究生院
- 12:10-12:20 Z-31 (Oral)**
Density functional study Weyl fermions and massless triply degenerate nodal points in MX-family (M= Ti, Zr, Hf and X= S, Se, Te)
 Sami Ullah
 中国科学院金属研究所
- 12:20-12:30 Z-32 (Oral)**
Modulation of electronic and magnetic properties of edge hydrogenated armchair phosphorene nanoribbons by transition metal adsorption
 饶勇超
 宁波大学理学院
- 12:30-13:30 Lunch**
- 单元 Z-4: 7 月 14 日下午**
主持人: 刘伟, 张瑞丰
地点: 会议中心 1D 会议室 (一楼)
- 13:30-13:50 Z-33 (Invited)**
双金属界面塑性起源和调控机理
 张瑞丰
 北京航空航天大学
- 13:50-14:10 Z-34 (Invited)**
钙钛矿体系界面电子态研究
 冯宏剑
 西北大学
- 14:10-14:30 Z-35 (Invited)**
铁硒体系中的掺杂和界面效应
 陈明星
 湖南师范大学
- 14:30-14:50 Z-36 (Invited)**
第一性原理界面热力学及其在合金材料优化设计中的应用
 江勇
 中南大学
- 14:50-15:10 Z-37 (Invited)**
金属材料吸附机理与功能化的基础研究
 高旺
 吉林大学
- 15:10-15:20 Z-38 (Oral)**
First-principles study of β -Ti/ ω -Ti interface
 曹烁
 中国科学院金属研究所
- 15:20-15:30 Z-39 (Oral)**
以丙炔半氢化为例探讨钼纳米晶体在碳氢活化中的晶面效应
 卜文逸
 苏州大学
- 15:30-15:50 茶歇**
- 15:50-16:10 Z-40 (Invited)**
金属载体催化剂在手性分离和选择加氢反应中的应用
 刘伟
 南京理工大学
- 16:10-16:30 Z-41 (Invited)**
复杂相界面错配位错的定量分析
 杨金波
 中国科学院金属研究所
- 16:30-16:50 Z-42 (Invited)**
Mg-Zn 合金中强化相析出机理研究
 谢耀平
 上海大学
- 16:50-17:10 Z-43 (Invited)**
A kinetic BGK scheme for the liquid-solid phase transition of alloys in the presence of melt convection
 孙东科
 东南大学
- 17:10-17:20 Z-44 (Oral)**
热力学极值原理在 Fe-C 合金中块体转变的应用
 李鑫
 西北工业大学
- 17:20-17:30 Z-45 (Oral)**
金属钪储氢: 稳定的钪氢化合物以及氢在钪晶格中的占位研究
 龙德兵
 湖北大学
- 17:30-17:40 Z-46 (Oral)**
不同错配度下 Ni-Ni₃Al 体系中 Cr 的占位行为及其对 O 的占位行为的影响的第一原理研究
 吴玉喜
 安徽工业大学
- 17:40-17:50 Z-47 (Oral)**
孪晶界对镁的阳极溶解影响的第一性原理计算研究
 马会
 中国科学院金属研究所

17:50-18:00 Z-48 (Oral)

钨表面点缺陷扩散的原子模拟

郝剑楠

北京航空航天大学

18:00-18:10 Z-49 (Oral)

D406A 高强度钢筒形件旋压成形数值模拟

李凯迪

西北工业大学

单元 Z-5: 7 月 14 日下午

主持人: 杨利明, 张助华

地点: 会议中心 1E 会议室 (一楼)

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

碳纳米结构独特的力磁耦合效应

张助华

南京航空航天大学

13:50-14:10 Z-51 (Invited)

硼基团簇的结构流变性: 亚纳米坦克履带、指南针、类地月系统

翟华金

山西大学

14:10-14:30 Z-52 (Invited)

二维纳米材料对生物分子结构影响的理论模拟研究

李伟峰

山东大学

14:30-14:50 Z-53 (Invited)

Electronic and transport features of zigzag phosphorene nanoribbons with nonmetallic atom terminations

汪浩

深圳大学

14:50-15:10 Z-54 (Invited)

二维材料与金属接触的界面性质

郭颖

陕西理工大学

15:10-15:30 Z-55 (Invited)

基于中国国家网络的计算材料云平台

乔楠

北京并行科技股份有限公司

15:30-15:50 茶歇

15:50-16:10 Z-56 (Invited)

新材料的第一性原理设计和预测

杨利明

华中科技大学

16:10-16:30 Z-57 (Invited)

固体材料热物性的第一原理计算和多尺度模拟

鲍华

上海交通大学

16:30-16:50 Z-58 (Invited)

功能材料物理化学性质的计算与调控

郭伟

北京理工大学

16:50-17:10 Z-59 (Invited)

团簇展开法在材料特性与新材料开发上的应用

黎明锴

湖北大学

17:10-17:30 Z-60 (Invited)

基于 MAPS 软件的锂电池性能多尺度研究

郑宏

北京泰科博思科技有限公司

17:30-17:40 Z-61 (Oral)

碘氧化的新型二维多孔 COF 材料的导电机理研究

张秋菊

中国科学院宁波材料研究所

17:40-17:50 Z-62 (Oral)

基于原子层沉积表面反应机理的前驱体设计与筛选

方国勇

温州大学

17:50-18:00 Z-63 (Oral)

纳米晶 W-In 体系的第一性原理计算研究

王奇

北京工业大学

18:00-18:10 Z-64 (Oral)

分子动力学模拟与模型结合研究填料(石墨烯,碳纳米管)接枝分子链对尼龙纳米复合材料导热性能的影响

高洋洋

北京化工大学

18:10-18:20 Z-65 (Oral)

渗透汽化膜限域传递机理分子动力学模拟研究进展

邹修洋

淮阴师范学院

单元 Z-6: 7 月 15 日上午

主持人: 魏苏淮, 冯元平

地点: 会议中心 1D 会议室 (一楼)

08:30-09:00 Z-66 (Keynote)

Pressure induced topological phase transition in layered Bi_2S_3

冯元平

新加坡国立大学

09:00-09:30 Z-67 (Keynote)

Large Scale GW calculations for 3D and 2D systems

张培鸿

美国纽约州立大学法布罗分校

09:30-10:00 Z-68 (Keynote)

Mechanism of Charge Separation and Exciton Structure in Carbon Nitride and Graphene Quantum Dots

张瑞勤

北京计算科学研究中心

10:00-10:30 茶歇

10:30-11:00 Z-69 (Keynote)

Band Structure Engineering and Defect Control of Oxides for Energy Applications

魏苏淮

北京计算科学研究中心

11:00-11:30 Z-70 (Keynote)

Disorder-related Thermal Transport in Part-crystalline Part-liquid Materials

张文清

南方科技大学

11:30-12:00 Z-71 (Keynote)

Band Structure Engineering of Strained Two-dimensional Materials

钟建新

湘潭大学

12:00-12:15 分会墙报颁奖仪式

单元 Z-7: 7 月 15 日下午

主持人: 敖冰云, 吴梦昊

地点: 会议中心 1D 会议室 (一楼)

- 13:30-13:50 Z-72 (Invited)**
氢键铁电体的第一性原理设计
吴梦昊
华中科技大学
- 13:50-14:10 Z-73 (Invited)**
低维单质材料中的铁电性和反铁电性
陆贇豪
浙江大学
- 14:10-14:30 Z-74 (Invited)**
铁掺杂氧化镁中压致自旋转变的研究
王贤龙
中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所
- 14:30-14:50 Z-75 (Invited)**
硬磁-软磁复合薄膜材料的磁性和磁各向异性第一性原理研究
袁宏宽
西南大学
- 14:50-15:10 Z-76 (Invited)**
铁电准同型相界处的畴结构以及压电性能的相场模拟
柯小琴
西安交通大学
- 15:10-15:20 Z-77 (Oral)**
基于原子力显微技术的压电材料非线性动力学分析
明文杰
湘潭大学
- 15:20-15:30 Z-78 (Oral)**
铁电材料的经典唯象理论模型
马文辉
汕头大学
- 15:30-15:50 茶歇**
- 15:50-16:10 Z-79 (Invited)**
钢系固态离子物理氧化态的第一性原理计算及应用
敖冰云
中国工程物理研究院材料研究所
- 16:10-16:30 Z-80 (Invited)**
单氧化钪稳定性的理论研究
邱睿智
中国工程物理研究院材料研究所
- 16:30-16:40 Z-81 (Oral)**
Ab initio study of native defects in LiTi₂O₄
王建川
中南大学
- 16:40-16:50 Z-82 (Oral)**
基于三维周期性极小面的多孔材料的设计
郑销阳
中国工程物理研究院激光聚变研究中心
- 16:50-17:00 Z-83 (Oral)**
镍基高温合金 γ' 相演变和蠕变性能的相场模拟
杨敏
西北工业大学
- 17:00-17:10 Z-84 (Oral)**
钛合金微观组织三维建模与晶体塑性有限元模拟
杨睿萌
西北工业大学
- 17:10-17:20 Z-85 (Oral)**
Ti-7333 合金晶体塑性有限元数值模拟与参数标定
张梦琪
西北工业大学
- 17:20-17:30 Z-86 (Oral)**
TA16 钛合金方形管绕弯回弹的数值模拟研究
刘聪
有研科技集团有限公司
- 17:30-17:40 Z-87 (Oral)**
镁中拉伸孪晶的自由表面热激活型核
汤笑之
北京交通大学
- 17:40-17:50 Z-88 (Oral)**
TiAlNb 基合金高温硬化和软化机制研究
张菁丽
西北有色金属研究院
- 17:50-18:00 Z-89 (Oral)**
超声场中 Al-Bi 偏晶合金液相分离过程的数值模拟研究
吴文华
西北工业大学
- 18:00-18:10 Z-90 (Oral)**
基于有限元模拟的不同 Q 值对 Zr-4 合金管材皮尔格轧制织构演变影响研究
储林华
国核宝钛铝业股份公司
- 18:10-18:20 Z-91 (Oral)**
CaO-SiO₂-Nd₂O₃ 渣系活度计算模型
智文科
昆明理工大学
- 单元 Z-8: 7 月 15 日下午**
主持人: 张永胜, 张妍宁
地点: 会议中心 1E 会议室 (一楼)
- 13:30-13:50 Z-92 (Invited)**
The Nature of Excess Electrons and their Roles in the Photocatalytic Activity of Reduced TiO₂
刘利民
北京计算科学研究中心
- 13:50-14:10 Z-93 (Invited)**
过渡金属硫化物析氢性能的理论研究与设计
张妍宁
电子科技大学
- 14:10-14:30 Z-94 (Invited)**
有机无机钙钛矿材料作为光催化产氢催化剂的机理研究
王璐
苏州大学
- 14:30-14:50 Z-95 (Invited)**
钌催化 C-H 活化和 C-C 偶联反应的机理研究
党延峰
天津大学
- 14:50-15:10 Z-96 (Invited)**
基于氢迁移反应路径的新型复合电解水纳米催化剂的理论模拟与设计
林海平
苏州大学
- 15:10-15:20 Z-97 (Oral)**
钙钛矿热力学稳定性新规律
孙庆德
苏州大学
- 15:20-15:30 Z-98 (Oral)**
柔性高温纳米介电复合材料中电热耦合击穿相场模型
沈忠慧
清华大学
- 15:30-15:50 茶歇**

- 15:50-16:10 Z-99 (Invited)**
硫族化合物热电性能的理论探讨
 张永胜
 中国科学院合肥物质科学研究院固体所
- 16:10-16:30 Z-100 (Invited)**
Theoretical and modeling design on both cathode and anode material system of lithium-sulfur battery
 张千帆
 北京航空航天大学
- 16:30-16:50 Z-101 (Invited)**
Designer materials for sustainable energy applications
 邵国胜
 郑州大学
- 16:50-17:00 Z-102 (Oral)**
Na⁺在 NASICON 结构固体电解质 Na₃Zr₂Si₂PO₁₂ 中的协同输运机制研究
 王达
 上海大学
- 17:00-17:10 Z-103 (Oral)**
锂-硫电池体系中多硫化锂结构的高精度量子力学方法表征
 赵焱
 武汉理工大学
- 17:10-17:20 Z-104 (Oral)**
碱金属电池电解液稳定性及负极保护策略研究
 陈翔
 清华大学
- 17:20-17:30 Z-105 (Oral)**
基于第一性原理的锂空气电池阴极催化剂研究
 杨影影
 大连理工大学
- 17:30-17:40 Z-106 (Oral)**
Li₂RuO₃ 富锂正极材料充放电过程结构相变及其对电化学性质的影响
 郑锋
 厦门大学
- 17:40-17:50 Z-107 (Oral)**
有机无机钙钛矿材料的表面缺陷结构
 刘云霞
 苏州大学
- 17:50-18:00 Z-108 (Oral)**
胼 (N₂H₄) 在二维无金属 SiC₃ siligraphene (g-SiC₃) 上的吸附和分解机理
 郑方方
 苏州大学
- 18:00-18:10 Z-109 (Oral)**
石墨表面分子自组装的形成及稳定性特征的多尺度模拟
 秦圆
 大连理工大学
- 单元 Z-9: 7 月 16 日上午**
主持人: 陈双林, 梁林云
地点: 会议中心 1D 会议室 (一楼)
- 08:30-08:50 Z-110 (Invited)**
Degradation of the effective thermal conductivity in irradiated fuels – A mesoscale modeling approach
 梁林云
 北京航空航天大学
- 08:50-09:10 Z-111 (Invited)**
力学与电化学交互作用下不锈钢亚稳态点蚀生长动力学的介观尺度模拟
 王海涛
- 中国科学院金属研究所
- 09:10-09:20 Z-112 (Oral)**
Visco-Plastic Self-Consistent modeling of Mg-Ca alloy to predict the mechanical responses and texture evolution
 Alireza Maldar
 上海交通大学
- 09:20-09:30 Z-113 (Oral)**
双相钢热处理过程中显微组织和碳分布演变的模拟研究
 安栋
 东南大学
- 09:30-09:40 Z-114 (Oral)**
局域能和局域应力在铝和铜的倾侧与扭转晶界的拉伸过程中的应用
 王昊
 上海大学材料科学与工程学院
- 09:40-09:50 Z-115 (Oral)**
金属铝的宽区多相物态方程理论研究
 赵艳红
 北京应用物理与计算数学研究所
- 09:50-10:00 Z-116 (Oral)**
基于层间界面不连续度对热导率影响的等离子喷涂层状热障涂层微观组织结构设计
 邱世毅
 北京航空航天大学
- 10:00-10:10 Z-117 (Oral)**
裂纹对热循环过程中大气等离子体喷涂热障涂层 TGO 层附近应力影响的有限元数值模拟研究
 王亮
 中国科学院上海硅酸盐研究所
- 10:10-10:30 茶歇**
- 10:30-10:50 Z-118 (Invited)**
高速高通量热力学与相平衡计算
 CompuTherm LLC
 陈双林
- 10:50-11:00 Z-119 (Oral)**
Ni-Ti-X (X=Cu, Hf) 体系相图热力学研究
 金波
 中南大学
- 11:00-11:10 Z-120 (Oral)**
压力下 Mg-Al-Sn 合金枝晶生长动力学和微观偏析的相场法模拟
 尚闪
 清华大学
- 11:10-11:20 Z-121 (Oral)**
激光立体成形 Ti-6Al-4V 热力耦合行为有限元分析及实验验证
 鹿旭飞
 西北工业大学
- 11:20-11:30 Z-122 (Oral)**
磁流变弹性体微观结构调控及宏观物理性质计算分析
 刘太祥
 中国工程物理研究院激光聚变研究中心
- 11:30-11:40 Z-123 (Oral)**
相场法模拟亚共析钢的膨胀曲线
 黄淋
 北京科技大学
- 单元 Z-10: 7 月 16 日上午**
主持人: 吕劲, 赵瑾
地点: 会议中心 1E 会议室 (一楼)

08:30-08:50 Z-124 (Invited)
凝聚态体系中激发态载流子的非绝热分子动力学模拟
赵瑾
中国科学技术大学物理系

08:50-09:10 Z-125 (Invited)
新型半导体光电材料的理论设计
张立军
吉林大学

09:10-09:30 Z-126 (Invited)
Dirac semimetal in type IV magnetic space group
徐刚
华中科技大学

09:30-09:40 Z-127 (Oral)
偏离中心的镜面对称保护的节点线半金属材料: BaLi₂Si
周攀
湘潭大学

09:40-09:50 Z-128 (Oral)
W_xMo_{1-x}S₂ 二维合金材料电子结构性质和热学性质的第一性原理研究
孟冬雪
湖北大学

09:50-10:00 Z-129 (Oral)
具有优异光伏性质的单层二硫化钼半导体新相结构的研究
徐美玲
吉林大学

10:00-10:10 Z-130 (Oral)
基于第一性原理对 Au 掺杂 ZnO 薄膜电子结构及热电性质影响的研究
刘杉
东北大学

10:10-10:20 Z-131 (Oral)
基于缺陷工程的过渡族金属掺杂 MoS₂ 性能调控
王怡人
中南大学

10:20-10:40 茶歇

10:40-11:00 Z-132 (Invited)
摩尔定律的下限在哪里?
吕劲
北京大学

11:00-11:20 Z-133 (Invited)
非线性光学材料的单原子响应理论
邓水全
中国科学院福建物质结构研究所

11:20-11:40 Z-134 (Invited)
含有四面体基元的深紫外非线性光学材料的设计研究
杨志华
中科院新疆理化所

11:40-11:50 Z-135 (Oral)
Eu²⁺激活氮化物荧光粉发光带宽与发光中心配位环境的第一性原理研究
罗倪
中国科学院福建物质结构研究所

11:50-12:00 Z-136 (Oral)
基于光子晶体对 BGO 闪烁体光提取效率影响的模拟研究
唐文
湘潭大学

12:00-12:10 Z-137 (Oral)
单层 InSe 的多体效应与晶体管性能极限
王洋洋

中国空间技术研究院钱学森空间技术实验室

12:10-12:20 Z-138 (Oral)
低维纳米材料的吸附与摩擦行为研究
陈韵
吉林大学

墙展

Z-P01
Electronic structures and optical properties of IV A elements doped 3C-SiC from density functional calculations
卢学峰
兰州理工大学

Z-P02
几种密排六方结构金属中晶格再取向路径的第一原理研究
周刚
中国科学院金属研究所

Z-P03
非中心对称 WC 型材料中声子外尔点
李江旭
中国科学院金属研究所

Z-P04
U-Nb 合金纽扣锭凝固过程相场模拟研究
郭军
中国工程物理研究院材料研究所

Z-P05
门可调的单层 MX₂ 1T'-2H 面内相接触界面性质
刘士琦
北京大学

Z-P06
Mo-Ni-W 三元系相图测定及热力学计算
汤梅芳
中南大学粉末冶金国家重点实验室

Z-P07
同心双环 B19-平面团簇: 内层(6σ + 2π) 和外层 (14σ + 10π) 四重芳香性
李蕊
山西大学分子科学研究所

Z-P08
三元 CBe₅H₄⁺团簇: 平面五配位碳 17 电子体系
冯林雁
山西大学分子科学研究所

Z-P09
Point defects in group III-nitrides by first-principles calculation
高寅露
大连理工大学

Z-P10
单层碲烯金属接触
严嘉欢
北京大学

Z-P11
CO 分子在 Fe(100)的独特键合机制
李佶彪
长江师范学院

Z-P12
Tunable negative permittivity and magnetic performance of yttrium iron garnet/polypyrrole metacomposites at the RF frequency
程传兵
山东大学

- Z-P13**
GaN(0001)表面水吸附的第一性原理研究
李仕琪
大连理工大学
- Z-P14**
静电悬浮液滴振荡形态研究与传热过程分析
李明星
西北工业大学理学院
- Z-P15**
稀磁单层中的巨挠曲磁电效应
沈宇皓
华东师范大学
- Z-P16**
Co-Ti 二元体系的实验测定和热力学计算
吴立颖
中南大学粉末冶金国家重点实验室
- Z-P17**
水分子在 Ni(001)金属表面的润湿行为
杨鑫
清华大学深圳研究生院
- Z-P18**
Failure assessment of nuclear graphite component in TMSR
高彦涛
中国科学院上海应用物理研究所
- Z-P19**
Pressure-driven structural evolution of YB6 under high pressure
Jianyun Wang
Jilin University
- Z-P20**
Ti 基合金体系扩散动力学数据库的建立
魏振帮
厦门大学材料学院及福建省材料基因工程重点实验室
- Z-P21**
氢在铅中溶解和扩散行为的第一原理研究
王子祺
北京航空航天大学
- Z-P22**
高铝玻璃微观结构的第一性原理研究
钱怡潇
浙江大学材料科学与工程学院
- Z-P23**
FCC 金属银中两种 FL 交滑移机制的竞争
李克强
中国科学院金属研究所
- Z-P24**
Re-Cr-X(X:Ru,Mo)各三元系相图的实验研究与热力学计算
李玲玲
厦门大学材料学院及福建省材料基因工程重点实验室
- Z-P25**
基于机器学习的固态电解质筛选
刘芬芬
电子科技大学
- Z-P26**
体心立方金属中六边形位错网的屈服准则
夏子雅
中国科学院金属研究所
- Z-P27**
决定晶体中位错结构与 Burgers vector 的基本准则
闫婧欣
中国科学院金属研究所
- Z-P28**
Effect of temperature on electronic properties of NiO: Insights from a many-body method
李如松
火箭军工程大学
- Z-P29**
层状金属碳化物制备机理与半导体性能的理论研究
查显弧
中国科学院宁波材料技术与工程研究所
- Z-P30**
半金属 TiF3: 一种有潜力的锂离子自旋电池的负极材料
王君茹
山东大学中心校区物理学院
- Z-P31**
Fractal Characterization of Relative Movement Modes in Simulated Friction and Wear Tests
江炜
常州工学院
- Z-P32**
锂离子在层状硒化铟里的吸附与迁移
张修营
北京大学物理学院
- Z-P33**
How do FeSi mesoscopic crystal growth: a quasi-static process from first principle calculation
蒋蕙宇
山东大学
- Z-P34**
First principles calculation of sensing mechanism of SnO2/ZnO nanofibers as CH3OH sensors
唐伟
山东师范大学物理与电子科学学院
- Z-P35**
锡烯在铜(111)表面生长的理论研究
吴曦
清华大学深圳研究生院
- Z-P36**
High Performance Sub-10 nm Bilayer Bi2O2Se Transistors
杨洁
北京大学
- Z-P37**
La-Sn 体系相图热力学研究
李晓静
中南大学
- Z-P38**
相场法研究 Ni-Al 间作用势对 Ni75Al14Cr11 合金 L10 预析出相的影响
董卫平
浙江师范大学
- Z-P39**
First-principles study of the structure of water layers on flat and stepped metal electrodes
林晓航
山东大学
- Z-P40**
First-principles study for nanoparticle quasi-static growth model in FeAl intermetallic
宋琳
山东大学材料科学与工程学院

Z-P41**高通量筛选高性能的母体 Half-Heusler 热电材料**

郭淑萍

中科院合肥物质研究院固体所

Z-P42**含三嗪结构的无定形多孔聚合物空间结构搭建算法的研究**

宋策

大连理工大学数学科学学院

Z-P43**面向钴基高温合金反应力场的开发**

郭静

上海大学

Z-P44**密度泛函理论研究应变和空位对氧化铬电子结构的影响**

米志杉

北京科技大学

Z-P45**铬掺杂对 α -Fe₂O₃ 薄膜电子结构和功函数的影响**

李小龙

北京科技大学

Z-P46**氢在钼铜合金中的溶解度、扩散系数和透氢率**

刘柳成

中南大学粉末冶金研究院

Z-P47**点缺陷调控 AgBiSe₂ 的电子结构来优化其热电性能**

冯真真

中科院合肥物质研究院固体所

Z-P48**聚变材料钨中多种类型空位型缺陷与氢行为的大尺度动力学蒙特卡洛模拟**

孟超

北京航空航天大学

Z-P49**Sachs 模型研究纳米孪晶铜的屈服强度**

肖建伟

燕山大学

Z-P50**二硼化钛跟二硼化锆中的拓扑狄拉克点-网费米子**

冯幸

燕山大学

Z-P51**Ti-55531 合金 β 锻本构关系及热加工图的建立**

潘浩

西北有色金属研究院

Z-P52**第一性原理：锆、锡、铅的掺杂对金属铝的结构及电子性质的影响**

彭明军

昆明理工大学

Z-P53**Two-Dimensional Tetragonal Titanium Carbide: A High-Capacity and High-Rate Battery Material**

樊冬

浙江工业大学材料科学与工程学院