

# 第三届中国科学院计算材料学与计算化学论坛

## 报到注册

时间：2017年12月13日 09:00-20:00

地点：北京计算科学研究中心 一楼大厅

## 论坛议程

北京计算科学研究中心 第二会议室 | 2017年12月14日-16日

2017年12月14日 星期五	
08:00 – 08:30	签到
<b>Morning Session I, Chair: 林海青 / 汪小琳</b>	
08:30 – 08:50	<i>Welcome &amp; Opening Ceremony</i>
08:50 – 09:00	<i>Photo Taking</i>
09:00 – 09:30 (30 minutes)	储祥蓄, 中物院研究生院 Effect of Nanodiamond surfaces on Drug Delivery Systems
09:30 – 10:00 (30 minutes)	孟胜, 中科院物理所 Quantum Engineering of Energy Conversion
10:00 – 10:15 (15 minutes)	余勇, 中物院四所 变形状态下高分子网链形成历史的数值模拟研究
10:15 – 10:35	<i>Tea &amp; Coffee Break</i>
<b>Morning Session II, Chair: 魏苏淮</b>	
10:35 – 11:05 (30 minutes)	张朝阳, 中物院三所 Tale of TKX-50 and HA-based Energetic Ionic Salts—Structures and Responses to Thermal-Mechanical Stimuli
11:05 – 11:35 (30 minutes)	黄兵, CSRC Defect and Doping Properties in Functional Materials
11:35 – 11:50 (15 minutes)	黄丽, 南方科技大学 Searching for substrate-supported 2D topological materials
11:50 – 12:05 (15 minutes)	周阳, 中物院三所 典型硝基芳香炸药的跨膜运输及其对膜的损伤
12:05 – 14:00	<i>Lunch (Canteen, B1 Floor) &amp; Break</i>
<b>Afternoon Session I, Chair: 高世武</b>	
14:00 – 14:30 (30 minutes)	李隽, 清华大学
14:30 – 15:00 (30 minutes)	张蕾, 中物院九所 共晶炸药微观电子结构-宏观晶体堆积-性能预测
15:00 – 15:30 (30 minutes)	张东波, CSRC 第一性原理声子准粒子及研究实例铍的热力学相变

15:30 – 15:50	<i>Tea &amp; Coffee Break</i>
<b>Afternoon Session II, Chair: 张东波</b>	
15:50 – 16:20 (30 minutes)	郑法伟, 中物院九所 材料中电子和声子结构的反折叠计算方法和应用
16:20 – 16:50 (30 minutes)	王建伟, 中物院五所 Theoretical investigations of vacancy diffusion in silicon
16:50 – 17:20 (30 minutes)	尹万健, 苏州大学 Perovskite Solar Cell: From Materials Properties to Stability Trend
17:20 – 17:35 (15 minutes)	邱睿智, 中物院七所 Stability of plutonium monoxide from first-principles calculation
17:35 – 17:50 (15 minutes)	谢朝阳, 中物院四所 基于元胞自动机的材料腐蚀演化模拟方法研究
18:00	<i>Dinner: Pickup to Sishitianyuan Restaurant</i>
2017年12月15日 星期五	
08:00 – 08:30	<b>签到</b>
<b>Morning Session I, Chair: 刘利民</b>	
08:30 – 09:00 (30 minutes)	杨增辉, 中物院五所 基于系综密度泛函理论的材料激发态性质新算法
09:00 – 09:30 (30 minutes)	管鹏飞, CSRC
09:30 – 09:45 (15 minutes)	陈金繁, 中物院七所 钴酞化合物在乙腈-水混合溶剂中催化产氢反应的第一性原理研究
09:45 – 10:00 (15 minutes)	晏顺坪, 中物院四所 基于贝叶斯方法的轻材料潮解模型选择研究
10:00 – 10:20	<i>Tea &amp; Coffee Break</i>
<b>Morning Session II, Chair: 张朝阳</b>	
10:20 – 10:50 (30 minutes)	姬广富, 中物院一所
10:50 – 11:20 (30 minutes)	刘利民, 北航
11:20 – 11:35 (15 minutes)	胡淑贤, CSRC
11:35 – 11:50 (15 minutes)	叶小球, 中物院七所 New insights into scandium-hydrogen phase diagram under pressure
11:50 – 12:05 (15 minutes)	储根柏, 中物院八所
12:00 – 14:00	<i>Lunch (Canteen, B1 Floor) &amp; Break</i>

<b>Afternoon Session I, Chair: 管鹏飞</b>	
14:00 – 14:30 (30 minutes)	崔旭东, 中物院三所
14:30 – 15:00 (30 minutes)	黄理, 中物院七所 铜系材料中混价行为与价态涨落的第一原理计算研究
15:00 – 15:30 (15 minutes)	任志勇, CSRC Quantum mechanical modeling of nanoscale optoelectronic devices
15:15 – 15:30 (15 minutes)	王鑫, 中物院七所 Phase stability of $UT_2Al_{20}$ (T=Mo,Nb,Ti,Zr) and electronic structure
15:30 – 15:50	<b>Tea &amp; Coffee Break</b>
<b>Afternoon Session II, Chair: 黄兵</b>	
15:50 – 16:20 (30 minutes)	孟令彪, 中物院八所 二维 IIA/IIB 金属碳化物单层材料电子结构与力学特性
16:20 – 16:50 (30 minutes)	卢海燕, 中物院七所 Electronic structure of cerium based heavy-fermion materials by means of a first-principles many-body approach
16:50 – 17:20 (30 minutes)	肖永浩, 中物院十二所 高通量材料计算支撑平台 HSWAP 研发进展
17:20 – 17:35 (15 minutes)	王晓媛, 中物院四所 MOF-5 材料力学与电学性质的第一原理计算
17:35 – 17:50 (15 minutes)	周韦, 中物院二所 $\alpha$ -Zr 中辐照损伤初期大缺陷形成机制的分子动力学模拟
18:00	<b>Dinner (Canteen, B1 Floor)</b>
2017 年 12 月 16 日 星期六	
<b>Morning Session I, Chair:任志勇</b>	
08:00 – 08:30	<b>会议室门口签到</b>
08:30 – 09:00 (30 minutes)	王旭, 中物院研究生院 强激光场中的原子分子: 基本物理简介以及对数值计算提出的挑战
09:00 – 09:30 (30 minutes)	尹强, 中物院八所 Effect of water in Poly(vinyl formal): Insight from the Molecular Dynamic Simulation
09:30 – 09:45 (15 minutes)	赵艳红, 中物院九所 炸药爆轰产物物态方程研究
09:45 – 10:00 (15 minutes)	黄河, 中物院七所 Phase stability of CrCoNi medium entropy alloy at finite temperatures
10:00 – 10:15 (15 minutes)	孙博, 中物院九所
10:15 – 10:30 (15 minutes)	金光希, 中物院二所 强关联材料 $La_2O_3Fe_2Se_2$ 中的电荷与自旋涨落