



河南师范大学
Henan Normal University

第 11 届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会

The 11th International Conference on Computational
Nano-science and New Energy Materials

会 议 手 册

主办单位：中国材料研究学会计算材料学分会

承办单位：河南师范大学物理与材料科学学院

2018年6月23日-26日

中国·新乡

会议组织机构

CNNEM-2018 会议名誉主席：张统一 院士

CNNEM-2018 会议主席：杨宗献

CNNEM-2018 学术顾问：

周震、赵纪军、陈中方、张瑞勤、马琰铭、孙强、刘智攀、李震宇、
丁益宏、丁峰、赵明文、刘利民、王红艳、尹利长、赵景祥、李亚飞、
戴振宏、陈刚、刘轶、杨宗献、李有勇、孙长庆、彭金璋、孙立忠

CNNEM-2018 会议组织委员会：

杨宗献、戴宪起、路战胜、付召明、夏从新、王广涛、马淑红、王天
兴、张岩星、马亚强、张喜林

会议网址：<http://www.htu.cn/cnnem11/>，

会议邮箱：CNNEM2018_HNU@163.com

会议服务联系：

会务：路战胜 13525021331 张喜林 15936569639

志愿者接站、引导服务：付召明 15903084799

后勤保障：张喜林 15936569639、马淑红 15936549981

墙报：王广涛 13782566150

会务发票、会议证明事宜：马亚强 15938483198

会场(ppt 拷贝等)：周忠坡 13673547315

参会须知

- 会议住宿：商会酒店、荷塘月色、石榴花园

- 报到注册：

联系人：路战胜 13525021331，张喜林 15936569639

6月23日 10:00-21:00,新乡商会酒店

6月24日 9:00-11:00,河南师范大学物理北楼3楼报告厅

- 会务费：现场缴费，教师代表 2000 元，在读学生 1500 元(凭学生证)。特别提醒：因财务规定，现场缴费只接受 POS 刷卡，不接受现金缴费。开发票请说明开发票要求，并提供纳税人识别号、抬头等。现场缴费的发票将于会议期间发放或会后邮寄。
- 会议用餐：午餐、晚餐均在商会酒店，详见会议日程。若对饮食有特殊要求的，请提前一星期与会务组联系。
- 代表证：出入会场、餐厅等场所请佩戴会议代表证。
- 会议报告：每天上午 8:00-8:20 拷贝当天上午所有报告 ppt，每天下午 13:30-13:50 拷贝当天下午所有报告 ppt。使用自己电脑的报告人也请在拷贝 ppt 时段测试投影设备的链接和显示。请主持人和报告人控制好报告时间。
- 开幕式往返交通：
商会酒店、荷塘月色、石榴花园→河南师范大学物理北楼
乘车时间：6月24日早 7:40。
河南师范大学物理北楼→商会酒店，乘车时间：6月24日午 12:05。

第 11 届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会

会议日程纵览表

Program of CNNEM-2018

日期	时间	活动	地点
6月24日 星期日 (Sun., June 24)	8:30-9:30	开幕式、 合影	河南师范大学物理北楼 3楼报告厅、物理楼前
	9:30-11:50	大会报告	河南师范大学物理北楼 3楼报告厅
	14:15-18:00	大会报告	商会酒店 多功能厅(4楼)
6月25日 星期一 (Mon., June 25)	8:30-12:00; 14:00-18:00	分会场一	商会酒店 地中海厅(3楼)
	8:30-12:00; 14:00-18:00	分会场二	商会酒店 茉莉厅(3楼)
	19:30-21:00	墙报及讨论	商会酒店 牡丹厅(4楼)
	8:30-12:00; 14:00-17:10	分会场一	商会酒店 地中海厅(3楼)
6月26日 星期二 (Tues., June 26)	8:30-12:00; 14:00-16:00	分会场二	商会酒店 茉莉厅(3楼)
	16:00-17:00	闭幕式及颁奖典礼 商会酒店 地中海厅(3楼)	

6月24日, 星期日, (Sun., June 24)

开幕式、合影

地点: 河南师范大学物理北楼3楼报告厅、物理楼前

Chair: Zongxian Yang (杨宗献)

8:30-9:10	开幕式 (Opening Ceremony)
9:10-9:30	合影 (Photos)

大会报告 (Plenary Talks)

Chair: Jijun Zhao (Dalian University of Technology), 地点: 河南师范大学物理北楼3楼报告厅				
Time	No.	Title	Speaker	Affiliation
9:30-10:05	K01	Surface induced size-dependent mechanical and thermal behaviors in nanomaterials --Theoretical modeling and atomistic calculations	Tong-Yi Zhang	Shanghai University, China
10:05-10:40	K02	Multiscale modelling of metal oxide interfaces and nanoparticles	Kersti Hermansson	Uppsala University, Sweden
10:40-11:15	K03	Understanding chemical properties of nanostructures from DFT simulations	Ruqian Wu	University of California, Irvine, USA
11:15-11:50	K04	The Weirdness of Semiconductors in a Flatland	Shengbai Zhang	Rensselaer Polytechnic Institute, USA
Lunch: 商会酒店3楼 地中海厅、茉莉厅				

Chair: Zhongfang Chen (University of Puerto Rico) 地点: 商会酒店4楼多功能厅;				
Time	No.	Title	Speaker	Affiliation
14:15-14:50	K05	The Materials Mating Game and Integrated Multi-scale Modeling from Atomistic to Plant scale.	Tom Woo	University of Ottawa, Canada
14:50-15:25	K06	A large scale calculation method based on orbital free DFT	Yanming Ma	Jilin University, China
15:25-16:00	K07	The Mechanism of 2D	Feng	Institute for Basic

		Materials Growth and Etching	Ding	Science, Republic of Korea
16:00-16:15	Tea & Coffee Break			
Chair: Zhen Zhou (Nankai University)				
16:15-16:50	K08	Crossing over from three-dimensional nonequilibrium growth to two-dimensional van der Waals epitaxy	Zhenyu Zhang	University of Science and Technology of China, China
16:50-17:25	K09	Novel design of 2D membranes for gas separations	De-en Jiang	University of California, Riverside, USA
17:25-18:00	K10	Accurate Van der Waals force field and its applications	Wei-Qiao Deng	Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, China
Dinner: 商会酒店 3楼 地中海厅				

6月25日，星期一，(Mon., June 25)

分会场一 商会酒店 3 楼 地中海厅				
主持人:	贾瑜 郑州大学			
8:30-8:50	I01	二维纳米半导体原子构型和电子结构的层数效应	刘轶	上海大学
8:50-9:10	I02	二氧化钛表面光催化反应机理的密度泛函理论研究	崔刚龙	北京师范大学
9:10-9:30	I03	二维异质结中的肖特基势垒和载流子量子输运第一性原理探索	张均锋	山西师范大学
9:30-9:45	O01	Computational Screening of Stable Anti-MoS ₂ Monolayers with Novel Electronic, Mechanical, and Optical Properties	李锋钰	内蒙古大学
9:45-10:00	O02	含有准平面五配位硅原子的二维单层的理论设计	王彧	南京师范大学
10:00-10:15	O03	半导体型单层硼平面	许少刚	华南理工大学
10:15-10:30	Tea & Coffee Break			
主持人:	刘轶 上海大学			
10:30-10:50	I04	Multivalency-Driven Formation of Te-Based Monolayer Materials: A Combined First-Principles and Experimental study	贾瑜	郑州大学
10:50-11:10	I05	First-principle simulation and design of graphene nanoribbon based devices	Wenchang Lu	North Carolina State University
11:10-11:30	I06	针对半导体中点缺陷发光量子效率的第一性原理计算	石林	中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所
11:30-11:45	O04	Red phosphorus in its two-dimension limit: novel clathrates with varying band gaps and superior chemical stabilities	朱志立	郑州大学
11:45-12:00	O05	基于碘量子点的可充电钠碘电池研究	王斌	新乡学院
午餐 商会酒店 4 楼多功能厅、牡丹厅				
主持人:	胡军 苏州大学			

14:00-14:20	I07	新型有机液流电池分子的设计与模拟	李亚飞	南京师范大学
14:20-14:40	I08	Searching visible light sensitive TiO ₂ nanotubes	Qiming Zhang	The University of Texas at Arlington
14:40-15:00	I09	低维功能材料在柔性印刷功能器件中的应用研究	梁嘉杰	南开大学
15:00-15:20	I10	The electronic structure and symmetric zigzag edge states of monolayer 1T-PtS ₂ under strain	刘自然	湖南师范大学
15:20-15:40	I11	黑磷的稳定新途径	唐春梅	河海大学
15:40-16:00	I12	Al(111)表面上蜂巢状硼烯的超导电性	高淼	宁波大学
16:00-16:15	Tea & Coffee Break			
主持人:	李亚飞 南京师范大学			
16:15-16:35	I13	Tunable Properties of Material Surface by Defects: from Theoretical Study to Experimental Design	李佳	清华大学
16:35-16:55	I14	Tuning the Atomistic Growth Mechanisms for Large-area Single Crystalline Stanene on Bi ₂ Te ₃ Substrates	李顺方	郑州大学
16:55-17:15	I15	新奇二维磁性材料（高 MAE 和高居里温度）的计算预测	蒋雪	大连理工大学
17:15-17:35	I16	几种硫族化合物及异质结构的电子特性计算研究	唐黎明	湖南大学
17:35-17:50	O06	新型二维材料结构设计与物性的理论研究	吴其胜	东南大学
晚餐 商会酒店 4 楼多功能厅				
19:30-21:00	墙报及讨论 商会酒店 4 楼 牡丹厅			

分会场二 商会酒店 3 楼 茉莉厅				
主持人:	陈克求 湖南大学			
8:30-8:50	I17	The Structure and Properties of 5f-superatomic Systems	王志刚	吉林大学
8:50-9:10	I18	Tight-Binding Calculation on Band Structure of Monolayer Blue Phosphorene	周光辉	湖南师范大学
9:10-9:30	I19	锂离子电池电极材料结构和物性的理论研究	张妍宁	电子科技大学
9:30-9:45	O07	BN 的定向排列	赵瑞奇	河南理工大学

9:45-10:00	O08	EAM Potential for Pt-Cu Alloys and Structure Search	雷雪玲	江西师范大学
10:00-10:15	O09	To decrease the size of Néel like skyrmions in hexagonal interface: based on NdJ relationship and First Principle calculations	朱岩	南京航空航天大学
10:15-10:30	Tea & Coffee Break			
主持人:	孙长庆 长江师范学院			
10:30-10:50	I20	分子尺度材料热、电输运机理与热电性能调控	陈克求	湖南大学
10:50-11:10	I21	纳米尺度界面光激发动力学	龙闰	北京师范大学
11:10-11:30	I22	氢键铁电/多铁体的第一性原理设计	吴梦昊	华中科技大学
11:30-11:45	O10	偏离中心的镜面对称保护的节点线半金属材料:BaLi ₂ Si	周攀	湘潭大学
11:45-12:00	O11	Effect of Orbital Redistribution on Perpendicular Magnetic Anisotropy of CoFe ₃ N Nitrides by Adsorbing Organic Molecules	李滋润	天津大学
午餐 商会酒店 4 楼多功能厅、牡丹厅				
主持人:	张妍宁 电子科技大学			
14:00-14:20	I23	硼烯晶体: 从结构设计到缺陷组装	张助华	南京航空航天大学
14:20-14:40	I24	Gate tunable structural transition and magnetism in 2D materials	杨腾	中科院金属所
14:40-15:00	I25	topological properties of carbon and boron materials	陈元平	湘潭大学
15:00-15:20	I26	微波腔中自旋波极化激元的二重与五重态	肖杨	南京航空航天大学
15:20-15:40	I27	Adsorption and Dissociation of Ammonia on Graphene Oxides, Functionalized Boron Nitride, and Borophene: A First-Principles Study	唐绍彬	赣南师范大学
15:40-16:00	I28	层状金属硫化物物理性质及催化性能的理论研究	黄玉成	安徽师范大学

16:00-16:15	Tea & Coffee Break			
主持人:	张助华 南京航空航天大学			
16:15-16:35	I29	Type I and type II hybrid nodal line system	孙立忠	湘潭大学
16:35-16:55	I30	选择性碳氢键活化的界面与晶面效应	林海平	苏州大学
16:55-17:15	I31	CaCu ₃ Ir ₄ O ₁₂ 体系中 d 电子重费米子形成机理研究	付召明	河南师范大学
17:15-17:35	I32	合金半导体材料力学性能的键合理论及声子计量谱学研究	杨学弦	吉首大学
17:35-17:50	O12	二维材料与金属接触的界面性质	郭颖	陕西理工大学
晚餐 商会酒店 4 楼多功能厅				
19:30-21:00	墙报及讨论 商会酒店 牡丹厅(4 楼)			

6月26日, 星期二, (Tues., June 26)

分会场一: 商会酒店 3 楼 地中海 厅				
主持人:	戴宪起 河南师范大学			
8:30-9:05	K11	From Type-III Dirac Fermion to Black Hole Hawking radiation	Feng Liu	University of Utah, USA
9:05-9:25	I33	Theoretical investigation of nonequilibrium topological state in strained black phosphorous	孙家涛	中国科学院物理研究所
9:25-9:45	I34	氧化物催化剂的理性设计	王卫超	南开大学
9:45-10:00	O13	铂单层氧还原催化剂在电化学环境下稳定性研究	张晓明	大连化学物理研究所
10:00-10:15	O14	Transition Metal Anchored C ₂ N Monolayers as Efficient Bifunctional Electrocatalysts for Hydrogen and Oxygen Evolution Reactions	陈安	南开大学
10:15-10:30	Tea & Coffee Break			
主持人:	李有勇 苏州大学			
10:30-10:50	I35	Design and Exploration of 2D materials based on DFT	马衍东	山东大学
10:50-11:10	I36	Modulating Oxygen Reduction Activity of Heteroatoms doped Carbon Catalysts via Triple Effect: Charge, Spin Density and Ligand effect	李莉	重庆大学
11:10-11:30	I37	Toward rational design of electrocatalysts for oxygen reduction reaction	肖建平	西湖大学
11:30-11:45	O15	Nature of extra capacity in MoS ₂ electrodes: Molybdenum atoms accommodate with lithium	王龙禄	湖南大学
11:45-12:00	O16	单层 TiO ₂ 激子能带结构及其光催化产氢性能设计	周伟	天津大学

午餐 商会酒店 4 楼多功能厅、牡丹厅				
主持人:	王卫超 南开大学			
14:00-14:20	I38	类碳硅复合纳米材料在能源及催化中的应用	李有勇	苏州大学
14:20-14:40	I39	基于第一性原理计算的 FeF ₃ 纳米片储能机理研究	杨振华	湘潭大学
14:40-15:00	I40	Electronic properties of 2D MX _n (M=matel, X=N, Cl, P) in Graphene	戴宪起	河南师范大学
15:00-15:15	O17	Molecular dynamics simulations of the self-organization of side-chain decorated polyaromatic conjugation molecules: phase separated lamellar and columnar structures and dispersion behaviors in toluene solvent	唐现琼	湘潭大学
15:15-15:30	O18	二维 TiO ₂ -MoS ₂ 异质结电子能带结构调控	刘彦昱	北京理工大学
15:30-15:45	O19	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
15:45-16:00	O20	一种全新的材料表面模型的原理与应用	董栋	费米科技(北京)有限公司
16:00-17:00	闭幕式 商会酒店 3 楼 地中海 厅			
晚餐 商会酒店 4 楼多功能厅				

分会场二: 商会酒店 3 楼 茉莉 厅				
主持人:	杨利明 华中科技大学			
8:30-8:50	I41	Computational design of energetic molecules	丁益宏	吉林大学
8:50-9:10	I42	二维锡化锗的材料设计	毛宇亮	湘潭大学
9:10-9:30	I43	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
9:30-9:45	O21	A constitutive model coupling neutron irradiation with two-phase lithiation for lithium-ion battery electrodes	马增胜	湘潭大学
9:45-10:00	O22	First-Principles Calculations of	王大帅	吉林大学

		MXene Monolayers as Potential electrode Materials for Lithium-Ion Batteries and Beyond		
10:00-10:15	O23	Mechanistic Insights into Electrolyte Stability toward Li/Na Anodes	陈翔	清华大学
10:15-10:30	Tea & Coffee Break			
主持人:	丁益宏 吉林大学			
10:30-10:50	I44	In-plane Schottky-barrier field-effect transistors based on 1T/2H heterojunctions of transition-metal dichalcogenides	范志强	长沙理工大学
10:50-11:10	I45	纳米材料类酶机制的计算研究	高兴发	江西师范大学
11:10-11:30	I46	奇异结构超导电性富氢材料设计	彭枫	洛阳师范学院
11:30-11:45	O24	硅烯, 磷烯和硼烯担载小尺寸硫分子用于高性能锂硫电池	李芬	大连理工大学
11:45-12:00	O25	新型层状卤素双钙钛矿光伏材料的理论设计	唐刚	北京理工大学
午餐 商会酒店 4 楼多功能厅、牡丹厅				
主持人:	王璐 苏州大学			
14:00-14:20	I47	分子组装与材料设计	杨利明	华中科技大学
14:20-14:40	I48	一种无机不含铅钙钛矿太阳能电池材料的设计	马春兰	苏州科技大学
14:40-15:00	I49	Theoretical Design on the Metal-Free Photocatalysts	张海军	中国民航大学
15:00-15:20	I50	silicone/SiC(0001)中的 PxPy 轨道拓扑 Dirac 电子态	郭志新	湘潭大学
15:20-15:40	I51	The High Performance of BN doped Graphene Field Effect Transistor: Quantum Transport Simulation	潘峰	陕西理工大学
15:40-15:55	O26	Engineering Cobalt Defects in Cobalt Oxide for Highly Efficient Electrocatalytic Oxygen Evolution	张蓉蓉	天津大学
16:00-17:00	闭幕式 商会酒店 3 楼 地中海 厅			
晚餐 商会酒店 4 楼多功能厅				

墙报： 时间： 6 月 25 日 19:30-21:00； 地点： 商会酒店 4 楼牡丹厅

编号	姓名	单位	标题
P01	邹争春	湘潭大学	新型拓扑半金属材料 TiBe 家族
P02	朱晓蓉	南京师范大学	Pd ₂ Se ₃ monolayer: a novel two-dimensional material with excellent electronic, transport, and optical properties
P03	朱昌华	上海大学	成分可控钨酸钼在高温下腐蚀抗性的研究
P04	周红才	青岛农业大学	co 固体材料
P05	郑星群	重庆大学	非金属原子对镍基化合物析氢活性的影响
P06	赵秀雯	山东师范大学	Spin polarization properties of PdSe ₂ introduced by 3d transition-metal doping: first-principles calculations
P07	赵小妹	湘潭大学	A new channel of styrene selective oxidation on gold catalysts: A Density Functional Theory Study
P08	赵佳	哈尔滨师范大学	Single transition metal atom embedded into a MoS ₂ nanosheet as a promising catalyst for electrochemical ammonia synthesis.
P09	张子赫	南开大学	Computational Screening of Layered Cathode materials for Multivalent Batteries
P10	张月凤	湖南大学	第一性原理研究氮掺杂的二氧化锡对电催化二氧化碳还原的影响
P11	张新越	四川大学	石墨烯及类石墨烯二维量子点的自旋磁性调控
P12	张旭	南开大学	An effective method to screen sodium-based layered materials for sodium ion batteries
P13	张修营	北京大学	锂和镁在硫化钾表面的吸附和迁移
P14	张新宇	燕山大学	Electron density topological analysis of Zr alloys
P15	张欣	北京化工大学	Ni ₂ P 催化水氧化的电化学性质的理论研究
P16	张薇	上海大学	BaZrO ₃ 的高温力学及热学性能研究
P17	张梦茹	大连理工大学	A Computational Study on Nanoporous Covalent Organic Frameworks for Effectively Anchoring Polysulfides in Lithium-Sulfur Batteries
P18	岳一蕾	燕山大学	Insights into the Li ⁺ storage mechanism of TiC@C-TiO ₂ core-shell nanostructures as high performance anodes
P19	杨莹	大连理工大学	Carbon Monoxide Adsorption in Isoreticular Metal-Organic Frameworks: A Computational Study
P20	易潇	湘潭大学	Nodal-chain semimetal in Ag ₂ BiO ₃
P21	姚赛	南开大学	SbP ₃ Monolayer as a Promising 2D Photocatalyst for Water Splitting
P22	杨小伟	大连理工大学	MXene nanoribbon as electrocatalysts for hydrogen evolution reaction with fast kinetics
P23	杨岚	上海大学	稀土烧绿石氧化物力学及热学性能的系统性研究
P24	杨娜	重庆大学	Influence of phosphorus configuration on Electronic Structure and Oxygen Reduction Reactions of phosphorus-doped graphene
P25	杨庆	华中科技大学	Co-mixing hydrogen and methane may double the energy storage capacity

P26	严嘉欢	北京大学	高表现的亚 5nm 单层碲烯晶体管
P27	杨腾	中科院金属研究所	Spontaneous magnetic order in alpha graphyne 2D system
P28	杨腾	中科院金属研究所	Bipolar electrical control of spin and charge in 2D limit
P29	薛哲	燕山大学	Rational design of highly efficient TiO ₂ -based photocatalysts for hydrogen generation
P30	薛莹莹	吉林大学	Theoretical Designs for Organoaluminum C ₂ Al ₄ R ₄ with Well-Separated Al(I) and Al(III)
P31	许晓培	北京化工大学	Pt single atom supported on MoS ₂ edges as bifunctional electrocatalyst for overall water splitting
P32	徐波	中国药科大学	Two dimensional Ferroelectrics
P33	熊琳	湘潭大学	Total Structure Determination of Au ₂₁ (S-tBu) ₁₅ and Theoretical Analysis of the Structure and Electronic Structure Evolution of Thiolate-Protected Gold Nanoclusters Containing Quasi Face-Centered-Cubic (FCC) Kernels
P34	裴琦	天津大学	Tunable electronic structure and magnetic coupling in strained two-dimensional semiconductor MnPSe ₃
P35	辛景凡	吉林大学	Bottom-up design of high-energy-density molecules (N ₂ CO) _n (n=2-8)
P36	王钟续	哈尔滨师范大学	Computational screening of a single transition metal atom supported on the C ₂ N monolayer for electrochemical ammonia synthesis
P37	季艳丽	天津大学	Valley Polarization and Biaxial Strain Dependent Conductivity of WS ₂ /SrRuO ₃ (111) Heterostructures
P38	邢健沛	大连理工大学	应变诱导 5d 过渡金属- (1, 3, 5) 苯三腈的磁各向异性的第一性原理研究
P39	殷励	天津大学	Tunable Valley and Spin Polarizations in BiFeO ₃ /BiIrO ₃ Multiferroic Superlattices
P40	赵民	西安交通大学	Study of two dimensional ferroelectricity and ferroelectric physics in layered CuInP ₂ S ₆ by first principles calculations
P41	王彧	南京师范大学	含有准平面五配位硅原子的二维单层的理论设计
P42	王新江	吉林大学	新型半导体光电材料的理论筛选与优化设计
P43	王伟	湘潭大学	Off-centered symmetries protected topological phases in BaLi ₂ Si
P44	王君茹	山东大学	半金属 TiF ₃ :一种有潜力的锂离子自旋电池的负极材料
P45	王聪	华中科技大学	Thermoelectric properties of Bi ₂ O ₂ X (X=Se, Te) from first-principles
P46	汪璞	湘潭大学	Revisit the Structure of Au ₂₀ (SCH ₂ CH ₂ Ph) ₁₆ : A Cubic Nanocrystal like Gold Kernel
P47	王邦辉	上海大学	金属改性钙钛矿锡酸盐: 导电及光学性质
P48	涂正远	华中科技大学	Transition-metal-doped group-IV monochalcogenides: a combination of 2D triferroics and diluted magnetic semiconductors
P49	唐晓婷	上海大学	第一性原理研究二维氧化锌纳米片原子构型和电子结构

P50	孙柱柱	信阳师范学院	新型有机空穴传输材料的理论计算与设计
P51	孙玉旺	吉林大学	New structural motif of 18 valence electron molecules with a planar tetracoordinate heavier group 14 center: Uniquetabilization effect of a π -type skeleton
P52	孙晓甜	洛阳师范学院	亚 5nm 砷烯锑烯场效应晶体管
P53	宋雪旦	大连理工大学	Hydrogen bonding between luminescent metal-organic framework and nitrobenzene in the electronic excited-state
P54	史博文	北京大学	n-Type Ohmic contact and p-type Schottky contact of Monolayer InSe Transistors
P55	任志鑫	燕山大学	First-principle investigations on structures and physical properties of Zr compounds
P56	任洋洋	华中科技大学	氢氧化钠和氢氧化钾铁电体中质子转移的多种模式
P57	任晓燕	郑州大学	Highly Efficient Single Atom Catalyst Design for CO Oxidation
P58	刘南舒	大连理工大学	单层 GaSe 的接触及电子输运性质
P59	乔曼	南京师范大学	The germanium telluride monolayer: a two dimensional semiconductor with high carrier mobility for photocatalytic water splitting
P60	裴玮	大连理工大学	氮掺杂碳材料与过渡金属（化合物）杂化体系的析氢反应：从原子水平理解协同效应
P61	潘圆圆	北京大学	从块状、二维到一维砷的多体效应和光学性质
P62	聂熙	山东大学	AlN 团簇的结构演变及吸附 Al、N、Fe、Cu 元素研究
P63	吕晓东	内蒙古大学	Tuning Electronic Properties of ZnSe Sheets by Cutting, Hydrogenating and Rolling: A Computational Investigation
P64	罗干	南京师范大学	2D Iron-Porphyrin Sheet as Superior Catalyst for Oxygen Reduction Reaction: A Computational Study
P65	刘霞	湘潭大学	Surface Confined One-Dimensional Eu-[CnHn-2] (n = 7 – 9) Sandwich Compounds and Molecular Wires Serves as Effective Spin Filters: A First Principle Study
P66	刘士琦	北京大学	Good electrical contact at monolayer Bi2O2Se – metal interface
P67	刘贍	湖南师范大学	Symmetrical metallic and magnetic edge states of nanoribbon from semiconductive monolayer PtS2
P68	刘芹茜	大连理工大学	层间耦合对二维有机材料 CTF, COF, BTA 电子性质影响
P69	邱彬	山东师范大学	Effects of defects on the electronic structure and optical properties of MoS2: first principles calculations
P70	刘立平	北京理工大学	Force field preconditioned ab initio structure relaxation method
P71	刘馥	上海大学	First-principles study of atomic and electronic structures of 2D GaN nanosheets
P72	林诗茹	University of Puerto Rico	Porous Silaphosphorene, Silarsenene and Silantimonene: a Sweet Marriage of Si and P/As/Sb
P73	林常青	南京工业大学	A first principle study of intrinsic point defects in 2D magnetic CrX3 (X = Cl, Br, I)
P74	李芬	大连理工大学	硅烯, 磷烯和硼烯负载小尺寸硫分子用于高性能
P75	侯鹏飞	湘潭大学	基于隧穿效应的超薄柔性电子器件柔性无机铁电隧道结

P76	李佳斌	湘潭大学	Surface oxidation: an effective way to induce piezoelectricity in 2D black phosphorus
P77	姜舟	大连理工大学	MnB (Mbene):具有高居里温度的新型二维金属铁磁体
P78	李静	湘潭大学	Theoretical investigation into the structure and catalytic activity of the gold clusters supported on Nitrogen-doped graphene
P79	黄保钰	湘潭大学	A Theoretical Study of Single-Atom Catalysis of CO Oxidation and the Role of Vacancies in the MgO(100) Support
P80	冯智萍	重庆大学	基于密度泛函理论研究碱性条件下 Pt(110)催化 HOR/HER 机理
P81	李位	吉林大学	Modulate the Charge Recombination Mechanism via Charge State of Iodine Vacancy Defect in Perovskite Solar Cells: Time-domain Ab Initio Analysis
P82	侯放	天津大学	The role of Mn-Ce interface for oxygen reduction reaction: Vital of Mn-Ce strong metal-support interaction and oxygen vacancy
P83	韩晓茹	吉林大学	四面体到平面四配位碳的转变: 离子性策略在 $CaI_3X(X=Al,Ga,In,Tl)$ 的应用
P84	韩楠楠	大连理工大学	石墨烯在合金衬底上和 h-BN 边缘的成核生长
P85	胡天丁	吉林大学	A quantum chemical insight on chemical fixation carbon dioxide with epoxides co-catalyzed by MIL-101 and quaternary ammonium salts
P86	丁俊	河南工程学院	$SmCrO_3$ 铁电性质及磁电耦合来源研究
P87	申世英	山东大学	Tl ₂ S: a metal-shrouded two-dimensional semiconductor
P88	薄晓旭	吉林大学	Potential energy surface of N5R: New isomer with good kinetic stability
P89	樊星	苏州大学	过渡金属/硅纳米复合材料作为析氢反应的最佳电催化剂设计与验证
P90	任裔	湖南师范大学	Negative Poisson's ratio in monolayer blue phosphorene nanoribbon with edge sulfur passivation
P91	吕鹏	北京理工大学	二维柔性高温半金属铁磁材料的第一性原理研究
P92	田斌伟	江苏科技大学	基于第一性原理的 GeP_3 表面气体分子吸附行为研究
P93	邓明明	重庆大学	Pt 基合金电催化过程中抗 CO 中毒机理研究
P94	尉益宁	山东大学	单层 $BeN_2 MgN_2$ 光催化性质的第一性原理研究
P95	许望平	南方科技大学	二维 VA 族半导体材料的结构预测及能带调控
P96	曹勇勇	浙江工业大学	二维碳材料负载单原子钌用于电催化合成氨理论研究
P97	李君君	鸿之微科技(上海)股份有限公司	柔性全黑磷电子器件输运性质的应力调控
P98	孙翔	浙江工业大学	Mxene 负载钯催化剂用于甲烷制醇的密度泛函理论研究
P99	郭尧	安阳工学院	有机无机钙钛矿表面分解与吸附的第一性原理研究
P100	邱成龙	浙江工业大学	Mxene 负载 Pt 纳米颗粒结构及稳定性的多尺度模拟
P101	刘方方	苏州大学	基于二维钛氟体系的合成氨反应电化学催化剂的理论设计与模拟
P102	马淑红	河南师范大学	Monolayer GeS as a potential candidate for NO ₂ sensor and capturer

P103	Wang Yiran	河南师范大学	Probing C3N/GRA Heterostructures as an Anode Material for Rechargeable Li-ion Batteries
注：上海超算科技有限公司将对评选出的优秀墙报（约占总墙报数目的 25%）进行机时奖励，并颁发证书。墙报现场备有部分临时展位，供未注册提交墙报的参会人员使用。			