



# 2024 材料多尺度计算模拟国际会议

International Conference of Multi-scale Modeling and Simulation of Materials  
(ICM<sup>3</sup>-2024)

# 会议手册

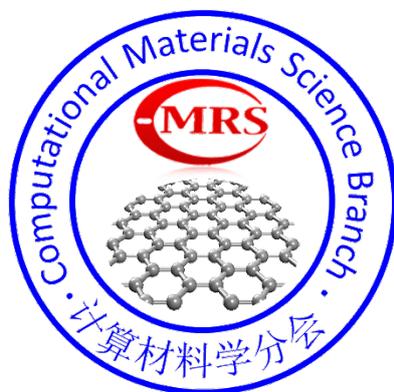
## Conference Manual



2024.07.03-09

中国 • 长沙  
Changsha • China





# 2024 材料多尺度计算模拟国际会议

International Conference of Multi-scale Modeling and Simulation of Materials  
(ICM<sup>3</sup>-2024)

# 会议手册





# 2024 材料多尺度计算模拟国际会议组织机构

## 主办单位

中国材料研究学会计算材料学分会

(Computational Materials Science Branch of Chinese Materials Research Society)

## 承办单位

湖南大学

中南大学

湖南师范大学

国防科技大学理学院

中南大学粉末冶金国家重点实验室

## 会议赞助

鸿之微科技股份有限公司

北京东方超算科技有限公司

曙光智算信息技术有限公司

北京龙讯旷腾科技有限公司

北京并行科技股份有限公司



## 顾问委员会 (ADVISORY COMMITTEE)

Chong-Yu Wang 王崇愚(Tsinghua U)

Heng-Qiang Ye 叶恒强(IMR, CAS)

Nan-Xian Chen 陈难先(Tsinghua U)

Bai-Xin Liu 柳百新(Tsinghua U)

Rui-Ping Gao 高瑞平(NSFC)

Le-Min Li 黎乐民(PKU)

Ding-Sheng Wang 王鼎盛(IOP, CAS)

Yi-Long Bai 白以龙(IMECH, CAS)

Ce-Wen Nan 南策文(Tsinghua U)

Bing-Lin Gu 顾秉林(Tsinghua U)

Jun-Zhi Cui 崔俊芝(AMSS, CAS)

## 学术委员会 (ACADEMIC COMMITTEE)

Tao Yu 于涛(CISRI)

Shen Jiang 申江(USTB)

Qiang Sun 孙强(PKU)

Ji-Jun Zhao 赵纪军(SCNU)

Dong-Sheng Xu 徐东生(IMR, CAS)

Zhi Zeng 曾雉(ISSP, CAS)

Yan-Ming Ma 马琰铭(Jilin U)

Guang-Hong Lü 吕广宏(BUAA)

Wen-Qing Zhang 张文清(SIC, CAS)

Wen-Hui Duan 段文晖(Tsinghua U)

Xin-Gao Gong 龚新高(Fudan U)

Su-Huai Wei 魏苏淮(CSRC)

## 组织委员会 (ORGANIZATION COMMITTEE)

### 名誉主席 (Honorary Chairman)

Ken-Li Li 李肯立

An-Lian Pan 潘安练

Ke-Chao Zhou 周科朝

### 大会共同主席 (Conference Co-Chairman)

Wang-Yu Hu 胡望宇

Jia-Yu Dai 戴佳钰

Ming-Xing Chen 陈明星

Li-Jun Zhang 张利军

### 委员 (Members)

Hui-Qiu Deng 邓辉球

Jie Hou 侯捷

Bo-Wen Huang 黄博文

Xiao-Fan Li 李小凡

Xiao-Xiang Yu 余晓翔

Bo Chen 陈博

Jing Zhong 钟静

Zi-Ran Liu 刘自然

Zi-Ming Zhu 朱紫明

Nuo Yang 杨诺

Dou Zhang 张斗

Wei-Feng Wei 韦伟峰

Bin Liu 刘彬

Zhuan Li 李专

Yan Zhang 张妍

Yin-Xiang Bao 鲍寅祥

# 目录

服务信息.....	1
会议详细议程.....	4
墙报信息.....	10
会议培训.....	17
会议记录.....	18



## 服务信息

### 一、注册信息

会务组委托湖南云竹教育科技有限公司处理收费及票务事宜!

#### 1.注册方式

线上注册: 2024年7月2日前访问会议网站 <https://www.icm3-2024.com/Rigister>

了解注册及缴费信息, 缴费备注“ICM3-2024, 姓名-单位”

现场注册: 湖南大学大礼堂前坪, 7月3日下午14:00 — 7月4日下午17:30。

#### 2.发票信息

6月份注册缴费, 6月末统一开票, 其他时间注册在会议结束后15个工作日内开票。

如有发票相关问题, 请联系: 孙云 13517495230

### 二、住宿信息

长沙福盛源大酒店(中南大学店) 湖南大学梅苑国际学术中心 湖南大学集贤宾馆

维也纳酒店(长沙岳麓山滨江大学城店) 通程麓山大酒店

### 三、出行建议

#### 湖南大学—湖南师范大学:

路线1: 乘坐地铁四号线--湖南师大地铁站-2号口下车

路线2: 乘坐大科城1/2/3号线--湖南师大地铁站-公交站下车

#### 湖南师范大学—中南大学:

路线1: 乘坐大科城1号线--树达学院-公交站下车

#### 中南大学—湖南大学:

路线1: 乘坐大科城1号线--湖南大学地铁站-公交站下车

**注意:** 中南大学会场相距其他会场较远, 请提前做好出行准备。



## 四、用餐信息

阶段	日期	用餐	时间	用餐地点
会议 报告	7月4日	午餐	12:10-14:00	详见餐券信息
		大会晚宴	18:20后	
	7月5日	午餐	12:00-14:00	
		晚餐	18:00-19:00	
	7月6日	午餐	12:00-14:00	
		晚餐	18:00-19:00	
培训	7月7日	午餐	12:00-14:00	中南大学本部 敏行餐厅
		晚餐	17:30-19:00	
	7月8日	午餐	12:00-14:00	
		晚餐	17:30-19:00	

## 五、联系方式

湖南大学 黄永峰: 18273110878

国防科技大学 王泓睿: 18670373197

湖南师范大学 张超华: 13687900892

中南大学 荔 琴: 15111463238



# 会议详细议程



时间：7月4日 地点：湖南大学南校区大礼堂				
时间	报告人	单位	大会特邀报告	主持人
9:00-9:30	大会开幕式	1. 湖南大学副校长李肯立致辞； 2. 计算材料学分会主任龚新高院士致辞； 3. 分会秘书长吕广宏介绍分会发展历程		胡望宇
9:30-9:50	大会合影			
9:50-10:50	张统一	上海大学	AI for Science(AI4S) and AI for Materials(AI4M)	吕广宏
茶歇 (10:50-11:10)				
11:10-11:40	高飞	University of Michigan	Strain Rate, Dose Rate and Rare Events in Atomistic Simulation: Past and Present	戴佳钰
11:40-12:10	姚裕贵	北京理工大学	晶体群表示及在量子材料中的应用	
午餐 (12:10-14:00)				
14:00-14:30	赵瑾	中国科学技术大学	固体材料光激发准粒子动力学	陈明星
14:30-15:00	向红军	复旦大学	Machine learning approaches in Property Analysis and Simulation Package for materials (PASP)	
15:00-15:30	袁声军	武汉大学	基于波函数含时演化的大尺度计算物理方法	
茶歇 (15:30-15:50)				
15:50-16:20	李谦	重庆大学	高性能镁基储氢材料设计及应用	张利军
16:20-16:50	宋海峰	北京应用物理与计算数学研究所	极端条件下材料物性集成计算	
16:50-17:20	吕广宏	北京航空航天大学	金属材料中子辐照多尺度模拟平台构建	
17:20-18:20	参观 POSTER , 湖南大学大礼堂前坪			
大会晚宴 (18:20) , 最佳 Poster 奖颁奖				



时间：7月5日 地点：湖南师范大学逸夫图书馆				
时间	报告人	单位	大会邀请报告	主持人
08:30-08:50	陈时友	复旦大学	半导体缺陷计算模拟及器件可靠性物理研究	钟志诚
08:50-09:10	杨玉荣	南京大学	铁电动力学研究进展	
09:10-09:30	朱紫明	湖南师范大学	Magnetic topological semimetals and Hall response	
09:30-09:50	喻国粮	复旦大学	Fractional Quantum Ferroelectricity	
茶歇 (9:50-10:10)				
10:10-10:30	钟志诚	中国科学技术大学苏州高等研究院	Deep charge: Deep learning model of electron density from a one-shot density functional theory calculation	陈时友
10:30-10:50	唐峰	南京大学	Realization of Hopf-link structure in phonon spectra	
10:50-11:10	吕京涛	华中科技大学	基于机器学习加速的电流诱导分子动力学	
11:10-11:30	段香梅	宁波大学	理解二维材料在催化还原反应中的结构-活性关系及其优化策略	
11:30-11:50	司晨	北京航空航天大学	二维硫族化合物中电荷密度波相变的理论研究	
午餐 (12:00-14:00)				

.....



.....

14:00-14:20	刘伟	中国科学院长春应用化学研究所	范德华力驱动的高性能微纳界面设计	谢禹
14:20-14:40	张卫兵	长沙理工大学	层状磁性材料的层间磁耦合和量子物性	
14:40-15:00	胡振芑	南开大学	HSH-Carbon 的热导率模拟计算	
15:00-15:20	余晓翔	国防科技大学	基于机器学习分子动力学的极端条件热输运研究	
茶歇 (15:20-15:40)				
15:40-16:00	谢禹	吉林大学	Machine-learning aided materials simulation software ARES and its applications	刘伟
16:00-16:20	陈博	国防科技大学	极端条件物质结构的原子尺度研究	
16:20-16:40	赵宏健	吉林大学	单斜氧化钪基铁电超晶格	
16:40-17:00	魏国	南方科技大学	在实验的时间尺度下精准的观测钨中空位的演化行为：基于机器学习力场的长时动力学模拟	
17:00-17:20	侯捷	湖南大学	聚变堆用钨/钼材料中氢滞留行为的多尺度模拟	
17::20-17:35	周谐宇	北京龙讯旷腾科技有限公司	PWmat 软件 rt-TDDFT 在超快动力学中的应用场景与计算思路	
晚餐 (18:00)				



时间:7月6日 地点:中南大学三一大楼 603 会议厅				
时间	报告人	单位	大会邀请报告	主持人
08:30-08:50	鲁晓刚	上海大学	金属结构材料的集成计算与工业化设计	周洪波
08:50-09:10	刘运牙	湘潭大学	Investigating the coupling between electrical and thermal fields in ferroelectrics via phase-field simulations	
09:10-09:30	郑福祿	德国康斯特大学	Design of High-performance Supramolecular Vesicular Photocatalysts Driven by Non-adiabatic Dynamics Simulations	
09:30-09:50	都时禹	中国石油大学（华东）	人工智能技术在关键核能材料的应用研究	
茶歇（9:50-10:10）				
10:10-10:30	周洪波	北京航空航天大学	金属钨中氢与缺陷协同演化机制及对力学性能影响研究	刘惠军
10:30-10:50	冯万祥	北京理工大学	First-principles studies on the unconventional anomalous transport properties of magnetic topological materials	
10:50-11:10	高旺	吉林大学	金属腐蚀及强化的共性微观起源：模型构建及应用	
11:10-11:30	蒋雪	华南师范大学	二维非范德华磁体的理论设计	
11:30-11:50	徐贲	中国工程物理研究院	磁性材料的深度学习势	
午餐（12:00-14:00）				

.....



.....

14:00-14:20	高威帷	大连理工大学	Lanczos 算法加速大规模 GW 计算	冯万祥
14:20-14:40	王昊	上海大学	合金元素对 $\gamma$ -TiAl 中层错能和位错性质的影响和 TiAlNb 深度势能的构造	
14:40-15:00	孔豪豪	钢铁研究总院有限公司	激光选区熔化制备 IN738LC 高温合金相变动力学研究	
15:00-15:20	钟静	中南大学	面向多参数、多来源数据的合金动力学数据库高效构建方法及其应用	
茶歇 (15:20-15:40)				
15:40-16:00	刘惠军	武汉大学	High-throughput prediction of lattice thermal conductivity via machine learning	鲁晓刚
16:00-16:20	郑伟森	上海大学	ICME 框架下汽车用高强钢的设计研发	
16:20-16:40	柳佳晖	北京科技大学	机器学习辅助大规模分子动力学模拟：钨的初级辐照损伤	
16:40-17:00	张朝	上海交通大学	A Study on the Carbide Evolution in Bainitic 2.25Cr1Mo Steel Subjected to Creep Rupture Tests aided by CALPHAD Method	
17:00-17:20	吴晗	中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心	Tetragonal-to-orthorhombic phase transition in ultrathin PbTiO <sub>3</sub> films under tensile epitaxial strain: A phase-field study	
17:20-17:35	胡亦斌	鸿之微科技(上海)股份有限公司	鸿之微软件在材料微观仿真领域的应用	
17:35-17:50	大会闭幕式	议程 1	青年才俊奖颁奖	张利军
		议程 2	下一届会议主办方交接	
		议程 3	分会秘书长吕广宏总结致辞	
晚餐(18:00)				

# 墙报信息



No.	墙报题目 / Poster Title	作者 / Author	单位 / Organization
1	Unveiling Polymer Conduction Mechanisms Under SHI Irradiation: A Multi-scale Computational Approach	顾耀辉	中国科学院现代物理研究所
2	通过表面氟化增强单层 NbSe <sub>2</sub> 的伊辛超导电性	吴忌征	北京航空航天大学
3	Investigation of composition on dislocation mobility in Ni-Co solid solutions by molecular dynamics simulation	刘瑞	上海交通大学
4	Calculation of oxygen chemical and self-diffusion coefficients in hypo-stoichiometric MOX fuel	赵祎玮	西安交通大学
5	PyPWDFT: An efficient Python toolbox for plane-wave DFT	高俊	中国科学技术大学
6	同类相斥作用体系下拥塞转变的临界行为研究	尹婷婷	华南理工大学
7	Achieving Spin Excited-state with Time-dependent Density Functional Theory in Plane-wave Basis Sets	崔昕晖	中国科学技术大学
8	KPROJ: A Band Unfolding Program for Phononic and Electronic Band Structures	陈家鑫	湖南师范大学
9	准等熵压缩下液态水的快速结冰	邓昶昊	国防科技大学
10	Anharmonicity and Superconductivity in Pm-3 XYB6C6	赵文博	吉林大学
11	MSene: A new large family of two-dimensional transition metal sulfide with MXene structure	路洪艳	曲阜师范大学
12	冷冻电镜中电子束辐照损伤的“笼”效应	李毅	国防科技大学
13	Flexible transparent penta-CdO <sub>2</sub> monolayer with negative Poisson's ratio and excellent solar light utilization for photocatalytic water splitting	彭科	桂林理工大学
14	主族金属元素助力甲酸的高效电化学合成	胡日茗	济南大学
15	超高导热材料砷化硼基异质结构中的热输运性质调控研究	秦光照	湖南大学
16	负载型 2D 碳基催化剂的理论设计与机理研究: CO/CO <sub>2</sub> 存储与转换	郭艺群	宁波大学



No.	墙报题目 / Poster Title	作者 / Author	单位 / Organization
17	High-throughput calculations of indirect-to-direct bandgap transitions for inverse design of Z-scheme heterojunctions by stacking (like-)TMDs	张茜	中国科学技术大学
18	Labyrinth to soliton transition in the $\text{PbTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ super-lattice driven by the electric field	李慧梅	中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心
19	应力对转角双层 $\text{MoS}_2$ 的电子结构调控	宋晨楠	吉林大学
20	氟化调控 $\text{Nb}_2\text{N}$ 铁电极化、拓扑及超导电性理论研究	焦娜	曲阜师范大学
21	Strength of Kitaev Interaction in $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ and $\text{Na}_3\text{Ni}_2\text{BiO}_6$	陈泽锋	复旦大学
22	扭角双层 Janus $\text{In}_2\text{SSe}$ 层间激子的计算研究	孟鑫勇	中国科学技术大学
23	二维 MXenes 及其范德华异质结电子性质与接触特性的高通量计算研究	曹丹	中国计量大学
24	芯片散热应用中的二维材料热输运性质电场调控研究	魏东海	湖南大学
25	基于第一性原理爆轰模拟的超高能量密度材料设计	郭德洲	北京理工大学
26	基于反式 Janus 结构的二维 Rashba 半导体设计与调控	秦真真	郑州大学
27	Enhancing Energy Storage Performance in $\text{BiFeO}_3$ Capacitors via Oxygen Vacancies and Strain Engineering	朱美雄	中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心
28	Band-Gap Renormalization via Dimensionality of Layered Materials: Two extreme cases	吴亚北	南方科技大学
29	二维磁性拓扑材料的理论设计与相关拓扑特性的调控研究	李杰	上海大学
30	Phase Diagram of growth modes in Graphene Growth on Cooper by Vapor Deposition	王彤彤	南京大学
31	Effects of charge transport on polarization of strained $\text{TiO}_2$ : A first-principles investigation	郑健	南京大学
32	基于纳米结构设计的热导率各向异性调控多尺度模拟研究	陈艾伶	湖南大学



No.	墙报题目 / Poster Title	作者 / Author	单位 / Organization
33	分子动力学模拟研究聚电解质溶液的充电机理	隋岩	华南理工大学
34	基于深度学习的(K, Na)NbO <sub>3</sub> 铁电材料相变和纳米畴拓扑结构的分子动力学研究	张旭	武汉理工大学
35	Main-group elements enhance electrochemical nitrogen reduction reaction of vanadium-based single atom catalysts through d-p orbital hybridization	王浩宇	济南大学
36	Rational design of precious tetrametallic single-cluster catalysts for electrocatalytic nitrate reduction reaction	朱若辰	济南大学
37	石墨烯同质界面热运输的分子动力学研究	吴帅	国防科技大学
38	Effect of strain engineering on the highly controllable H <sub>2</sub> purification performance of graphenylene-like boron nitride membranes: DFT calculations and MD simulations	郭文涛	河南科技大学
39	Ce-La 合金表面氢扩散行为的第一性原理研究	温欣	上海交通大学
40	Breaking the trade-off of permeability-selectivity: Strain-assisted T-C <sub>3</sub> N <sub>2</sub> membranes for high-efficient helium separation and purification from gas mixture	侯奇华	河南科技大学
41	Optical spectrum of ferrovalley materials: a case study of Janus H-VSSe	罗朝波	湘潭大学
42	First-principles study of Cu <sub>3</sub> PS <sub>4</sub> for p-type transparent conductive materials	薛阳	广西大学
43	Band gap tailoring in a low toxicity, low-cost solar cell absorber Cu <sub>3</sub> SbS <sub>4</sub> via A-alloying (A=V, Nb, Ta): From first-principles study to device simulation	林常青	广西大学
44	First-principles study and SCAPS-1D simulation on Cu <sub>3</sub> AsS <sub>4</sub> as an earth abundant PV absorber material	黄溢	广西大学
45	Screening the suitable cationic dopants for realizing p-type CdSnP <sub>2</sub> : A first-principles study	张晟烽锐	广西大学
46	Ferrielectric ground state stabilized by phonon free energy in CuInP <sub>2</sub> S <sub>6</sub> thin films	李胜贤	湖南师范大学
47	The structural and photoelectrical behavior of low dimensional polar materials from first-principles study	殷文金	湖南科技大学
48	Revisiting Mechanism of Type-II Multiferroicity in Pure and Al-Doped CuFeO <sub>2</sub>	朱炜钦	复旦大学



No.	墙报题目 / Poster Title	作者 / Author	单位 / Organization
49	晶格拓扑结构设计及高性能材料预测	高乾	南开大学
50	通过卤素钙钛矿纳米线 $Cs_4MX_5$ 内部填充实现碳纳米管的 n 型掺杂	曹思思	湘潭大学
51	Pentagonal monolayer HgO <sub>2</sub> for photocatalytic water splitting with ultrahigh anisotropic carrier mobility and low Gibbs free energy	陈博文	桂林理工大学
52	Influence of electrodes on ferroelectric polarization intensity in ferroelectric/electrode system	王强	中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心
53	CuW 层压板界面扩散与 Cu 对 W 辐照缺陷的影响研究	李一钊	北京航空航天大学
54	中子辐照下钼中合金化元素镍聚集析出机制研究	吴向前	北京航空航天大学
55	碳化硅强化铝基复合材料的数字孪生及其在激光冲击强化的应用	林奎鑫	广西大学
56	高熵合金晶界介导塑性变形的组分-载荷耦合效应	李晓彤	北京交通大学
57	结构相变诱导的 $\beta$ -HMX 的裂纹成核和扩展	李佳惠	中国科学院合肥物质科学研究院 固体物理研究所
58	生焦抑制剂对针状焦中间相聚合的影响	任强	中石化石油化工科学研究院有限公司
59	过渡金属硫化物析氧反应过程中重构机理的理论设计与模拟	王万英	南开大学
60	Impact of Zn segregation on the strength of BCC Fe grain boundaries: an atomistic simulation study	梅豪杰	上海交通大学
61	$Na_5YSi_4O_{12}$ 型锂和钾固态电解质的理论研究	李兆	吉林大学
62	Chemical short-range order in Ti-Al-Nb-Zr refractory high entropy alloys	王敏	上海交通大学
63	The vacancy-mediated diffusion of transition metal solutes in tungsten: Atomic kinetic Monte Carlo simulations	井水清	山东大学
64	Study on energy and structure of tungsten symmetric inclined grain boundaries	冯国箏	山东大学



No.	墙报题目 / Poster Title	作者 / Author	单位 / Organization
65	Relative stability of vacancy type defects in aluminum under stress	张原野	山东大学
66	Improving the density functional theory prediction accuracy for elastic moduli and thermal expansion of $\text{MoAlB}$ , $\text{Fe}_2\text{AlB}_2$ , and $\text{Mn}_2\text{AlB}_2$	秦可斌	哈尔滨工业大学
67	Wetting Behavior of Zn Droplets on Fe Surfaces: Insights from Molecular Dynamics Simulations	程路遥	上海交通大学
68	TiZrNbVAl 高熵合金中间隙氧局部位点偏好的第一性原理计算研究	刘锐丽	上海理工大学
69	Effect of $\Sigma 5(210)[001]$ symmetric tilt grain boundary on the compatibility between iron and liquid lithium: Atomistic simulations	徐超	山东航空学院
70	具有逐层破坏行为的钛合金梯度点阵计算设计	马玉婷	上海理工大学
71	稀合金和浓缩合金固溶强化的电子起源	李昕	吉林大学
72	Molecular Dynamics simulation of Punched loop detachment during He bubble growth in nickel	温阿利	中国科学院上海应用物理研究所
73	Molecular dynamics simulations of one-dimensional fast migration of vacancy loops in FCC metals	贾同轩	湖南大学
74	化学环境和磁效应对高熵合金间隙缺陷稳定性的调控	骆之岭	吉林大学
75	国产超算上的材料辐照损伤大规模并行多尺度计算	储根深	北京科技大学
76	基于加速分子动力学的多组元合金中空洞形核研究	杨腾飞	湖南大学
77	锂二次电池电极包覆材料的计算模拟与设计	刘波	井冈山大学
78	Combustion synthesis of the MAB phases and theoretical analysis	尹航	哈尔滨工业大学
79	Advancing Mn-Based Electrocatalysts: Evolving from Mn-Centered Octahedral Entities to Bulk Forms	李欢	南开大学
80	ARES:第一性原理实空间计算软件在大尺度分子动力学方法的应用	郑翔宇	吉林大学
81	DeepH + HONPAS: 机器学习杂化泛函计算	柯逸凡	中国科学技术大学



No.	墙报题目 / Poster Title	作者 / Author	单位 / Organization
82	First-principles and machine learning study on solute interaction in metals	何康尼	山东大学
83	Revealing the relationship between structure and activity on transition metal-doped $\gamma$ -GeSe monolayer for CO <sub>2</sub> reduction	康旭鑫	宁波大学
84	主动学习加速晶体结构预测	李家祥	吉林大学
85	用于先进功能材料设计的自监督晶体结构-性质预测框架	韦依	湖南大学
86	基于图论算法的晶体结构分析程序	杨骊元	南开大学
87	Understanding Stacking Fault Energy of NbMoTaW High Entropy Alloys by Interpretable Machine Learning	李泽峰	北京航空航天大学
88	Quantitative characterization of the microstructure of GH4742 superalloy	李岩	北京科技大学
89	Cu-Ni-Co-Si 合金热/动力学数据库及其在时效过程定量模拟中的应用	凌昊月	中南大学
90	基于关键特征参量的机器学习析氢催化剂预测	王朝	北京工业大学
91	镍基粉末高温合金的室温和高温力学性能：机器学习建模与实验验证	金衍成	中南大学
92	Al-Si-Mg-Sb 四元系热力学数据库及其在 Sb 改性 Al-Si-Mg 铸造合金中的应用	徐道驹	中南大学
93	单质金属玻璃中的新型原子结构与断裂过程中的裂纹传播	蒋元祺	南昌师范学院
94	基于群论和图论的晶体结构预测方法及其应用	何朝宇	湘潭大学
95	Synergistic Effects of Surface Structure and Defects on the Mechanism of CO <sub>2</sub> Photocatalytic Reduction in BiOX (X = Cl, Br, I): A First-Principles Study	王心雨	北京化工大学
96	Ovonic Threshold Switching Induced by Reversal of Peierls-like Distortion in GeSe <sub>2</sub> Glass	张烜广	北京航空航天大学
97	Competing Anharmonic Effects in Uranium at High Temperatures and Pressures	包南云	国防科技大学
98	二维铁磁材料中陈数可调的量子反常霍尔效应	李树宗	长沙理工大学



## 会议培训

日期	时间	培训题目	地点
2024.7.7	上午	国产相图相场软件PhaseLab产品介绍	中南大学 三一大楼409
		国产相图相场软件PhaseLab应用案例	
		国产相图相场软件PhaseLab实操培训	
	下午	PWmat软件实训-有机分子辐照分解中的载流子冷却过程	
		PWmat软件实训-熔融反应室涂层材料的质子轰击过程	
2024.7.8	上午	材料塑性成形有限元基本原理(Deform)	中南大学 三一大楼409
		材料热处理相变动力学模拟及应用(Deform)	
	下午	塑性变形过程中的微观结构演变模拟及应用(Deform)	
		材料微观组织本构的参数拟合计算及DOE数据分析(Deform)	

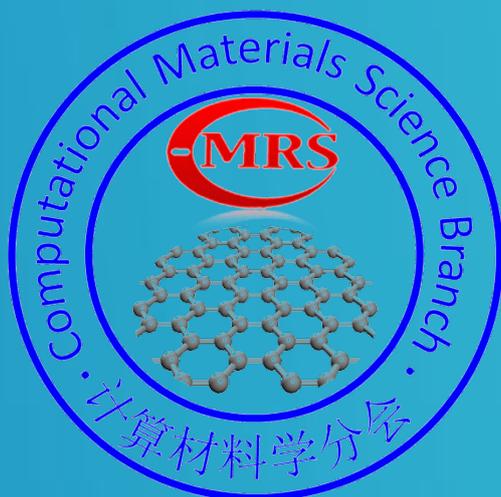












## 主办单位

中国材料研究学会计算材料学分会

Computational Materials Science Branch of Chinese Materials Research Society

## 承办单位

湖南大学 中南大学 湖南师范大学

国防科技大学理学院 中南大学粉末冶金国家重点实验室

## 会议赞助

