



理论与高性能计算材料、化学与物理学学术会议

会议日程

注册地点	西南大学材料与能源学部 (21 教大厅)				
注册时间	12 月 20 日 8:00-20:00, 21 号全天 (图书馆顶楼报告厅)				
会议时间	2018 年 12 月 21 日-2018 年 12 月 22 日				
注册费用	免费				
2018 年 12 月 21 日					
地点	时间	主持人	开幕式		
西南大学中心图书馆 15 楼	08:30-08:32	郑绍辉	大会主席致辞		
	08:32-08:37		西南大学材料与能源学部陈志谦部长致辞		
	08:37-08:42		浪潮集团钟华经理致辞		
	08:42-08:47		重庆怡讯网络技术有限公司黄宇经理致辞		
	08:47-09:00	集体合影			
地点	时间	主持人	报告人	报告题目	
西南大学中心图书馆 15 楼	09:00-09:25	郑绍辉	李亚飞	新颖二维氧还原电催化剂的设计与模拟	
	09:25-09:50		李佳	Boosting oxygen catalysis performance of the-state-of-art catalysts by multi-field modulation	
	09:50-10:15		刘淼	铁铈二元磁性合金低指数表面特性的第一性原理计算	
	10:15-10:40		张凤英	钙钛矿材料光电性能及应用的研究	
	茶歇				
	10:50-11:15	李亚飞	张妍宁	能源材料结构和物性的理论研究	
	11:15-11:40		郑绍辉	Application of density functional theory: from combustion to energy materials	
	11:40-12:05		申伟	Theoretical study on photoluminescence mechanism of phosphorescent materials	
西南大学兰苑宾馆	午餐 (自助餐)				
西南大学中心图书馆 15 楼	13:30-13:55	周健	王林军	Methods for Complex Crossing and Decoherence Correction	
	13:55-14:20		袁宏宽	Magnetization and Magnetic Anisotropy of Low Dimensional Soft-Hard Magnetic Compositions	

	14:20-14:45		李登峰	Thermal transport of hydrogenated borophene and Borophene Hydride	
	14:45-15:10		钟承勇	Oxidizingly-driven semimetal in two-dimensional honeycomb materials	
	15:10-15:35		廖天军	近场热光伏电池的优化性能特性	
	茶歇				
	15:45-16:10	王林军	周健	响应聚合物的多尺度模拟	
	16:10-16:35		何奕	Exploring Reaction and Transport in External Electric Fields at the molecular level	
	16:35-17:00		陈彦涛	多肽自组装调控的胰岛素控制释放	
	17:00-17:25		刘俊	强有力的成键分析方法以及模拟慢速反应的力场方法	
西南大学兰苑宾馆	晚餐				
地点	时间	主持人	学生报告人	报告题目	
材料与能源学部-21教105	19:45-20:03	袁宏宽	邱静	Crossing Classification and Simplification in Surface Hopping Simulations	
	20:03-20:21		孙文博	OPV Materials Evaluation with Deep Learning	
	20:21-20:39		陈文蓝	理论研究发现 subphthalocyanine-AzaBODIPY-C60 supramolecular triad 存在多种电荷传输状态	
	20:39-20:57		王凤起	The electronic and optical properties of $\text{Ca}_3(\text{Mn}_{1-x}\text{Ti}_x)_2\text{O}_7$ revealed by first-principle calculation	
	20:57-21:15		彭索萍	边缘取代对 Subazaphenalenephthalocyanines 的结构和光学性质影响的理论研究	
	21:15-21:33		侯循	三种石墨炔型 BCN、 BC_2N 结构的第一性原理研究	
	21:33-21:51		邱梧珂	石墨烯缺陷类型对核磁共振参数的影响：一个基于密度泛函理论的研究	
2018年12月22日					
地点	时间	主持人	报告人	报告题目	
西南大学中心图书馆15楼	08:30-08:55	易院平	王志刚	超原子团簇的结构与功能特性研究	
	08:55-09:20		黎安勇	Noble Gas Compounds: Structures and Bonding	
	09:20-09:45		杨刚	Catalytic Formation of Acid Rain over Mineral Dusts	
	09:45-10:10		王静波	The development of a detailed pyrolysis mechanism for C1-C4 hydrocarbons	
	茶歇				
	10:20-10:45	王志刚	易院平	有机光伏理论模拟	
	10:45-11:10		汪志勇	Charge Reversal and Giant Charge Reversal	
	11:10-11:35		任海生	非平衡溶剂化新理论在超快过程中的解析模型	
11:35-12:00	何俊杰		Designing 2D Antiferromagnetic Spintronics Materials from the First-Principle		

材料与能源 学部-21 教 105	09:00-11:30	郑绍辉	刘俊	ADF 培训会
西南大学兰 苑宾馆	午餐（自助餐）			
西南大学中 心图书馆 15 楼	13:30-13:55	王繁	朱小飞	Query Recommendation Based on Mining Users' Search Behaviors
	13:55-14:20		朱权	Relationship between Energetic Performance and Clustering Effect on Incremental Nitramine Group: A Theoretical Perspective
	14:20-14:45		王音	FIRST - Fast Informatics viRtual Screening Tool for Materials Informatics
	14:45-15:10		刘华可	Hydrogen-decorated stabilization and thermal conductivity of biaxially strained penta-silicene: A first principle calculation
	茶歇			
	15:20-15:45	刘华可	王繁	自洽态特定 TDDFT 方法研究吸收和发射光 谱的非平衡溶剂化效应
	15:45-16:10		向芸颀	通过 DFT 和 TD-DFT 理论研究五个新的基于 silolo dithiophene 的 D-A-D-A-D 供体分子的 基态电子结构、紫外-可见光谱以及这些分子 与 PC71BM 组成的太阳能电池的开路电压
	16:10-16:35		冯春宝	CoX ₂ O ₄ (X=Al, Ga, In)合金的电子性质和光 学性质研究
2018 年 12 月 22 日：代表离会				

注：

- 1、12 月 21 号晚上 19:45-22:00 为学生报告时间，报告地点为 21 教 105，欢迎各位老师莅临指导；
- 2、学生报告时间为 15 分钟，3 分钟提问时间；
- 3、12 月 22 日上午 09:00-11:30 为 ADF 培训时间，培训地点为 21 教 105，感兴趣的老师和同学可以到场学习。