

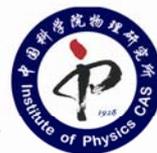


大连理工大学

Dalian University Of Technology

中科院物理研究所

Institute of Physics Chinese Academy of Sciences



第九届国际凝聚态理论与计算材料学会议

*The 9th International Conference on Condensed
Matters Theory and Computational Materials Science*



2010.7.4~2010.7.8

主办单位：中国大连理工大学 中国科学院物理所

承办单位：中国大连理工大学交叉学科研究院(原高科技研究院)

三束材料改性教育部重点实验室(大连理工大学)

联系人：赵纪军，王璐（大连理工大学高科技研究院）

会务组联系电话：13478630845

E-mail: zhaojj@dlut.edu.cn, wanglu@mail.dlut.edu.cn

会议日程表

7月5日上午，大会报告（主持人：张振宇）		
地点：会展中心一期2楼1号会议厅		
8:30-9:10	开幕式，合影	
9:10-9:50	夏建白 (中科院半导体研究所)	Quantum waveguide theory of Rashba electron
9:50-10:05	茶歇	
10:05-10:45	朱邦芬 (清华大学)	纯自旋流的非线性光学效应
10:45-11:25	邢定钰 (南京大学)	纳米电机单电子晶体管的自旋阀效应和自旋注入
11:25-12:05	徐洪起 (瑞典 Lund 大学)	Spin states and spin transport in semiconductor nanostructures

7月5日下午，大会报告（主持人：徐洪起）		
地点：会展中心一期2楼1号会议厅		
14:30-15:10	陈难先 (清华大学)	Möbius Inversion in Material Physics
15:10-15:50	包信和 (中科院大连化物所)	Interface tuning of complex heterogeneous catalytic systems
15:50-16:30	张世伟 (美国 William and Mary 学院)	Quantum Monte Carlo simulations – towards ab initio calculations in lattice models and in real materials
16:30-16:45	茶歇	
16:45-17:25	张振宇 (美国橡树岭国家实验室)	Managing Photons Using Metal Nanostructures for Molecular Sensing and Energy Conversion
17:25-18:05	张绳百 (美国 Rensselaer 理工学院)	Boundary Effects on the Electronic States of Nanomaterials
18:30-20:00	欢迎晚宴（地点：大连之夜宴会厅2楼A厅）	

7月6日上午, 计算材料学分场, 邀请报告 (主持人: 潘必才)		
地点: 会展中心一期2楼2号会议厅		
8:00-8:20	刘邦贵 (中科院物理所)	Novel half-metallic ferromagnets from first principles
8:20-8:40	崔田 (吉林大学)	超高压下富氢体系的金属化和奇异超导特性
8:40-9:00	马琰铭 (吉林大学)	基于粒子群优化算法的晶体结构预测及其应用
9:00-9:20	张瑞勤 (香港城市大学)	Surface effects of semiconducting nanowires
9:20-9:40	杜勇 (中南大学)	Al 合金的热物理性能及扩散微结构的相场方法模拟
9:40-10:00	李希茂 (宏剑公司)	材料设计中第一性原理方法的应用实例简析
10:00-10:15	茶歇	
7月6日上午, 计算材料学分场, 邀请报告 (主持人: 刘邦贵)		
地点: 会展中心一期2楼2号会议厅		
10:15-10:35	杨仕清 (电子科技大学)	新型热电材料的原子分子设计与合成研究
10:35-10:55	张刚 (北京大学)	Violation of Fourier's Law and Anomalous Heat Diffusion in Low-Dimensional Nano Structures
10:55-11:15	夏钊 (北京师范大学)	磁性隧道结的热电效应研究
11:15-11:35	潘必才 (中国科技大学)	反钙钛矿锰氮化合物负热膨胀的第一性原理研究
11:35-11:55	刘惠军 (武汉大学)	Transport coefficients of thermoelectric materials from multi-scale calculations

7月6日下午, 计算材料学分场, 邀请报告 (主持人: 崔田)		
地点: 会展中心一期2楼2号会议厅		
14:30-14:50	王光瑞 (北京应用物理与 计算数学所)	堆材料的辐照损伤
14:50-15:10	耿文通 (北京科技大学)	金属中的氢
15:10-15:30	吕广宏 (北京航空航天大学)	钨材料中氢氦行为
15:30-15:50	孙强 (郑州大学)	Hydrogen interaction with light metal films
15:50-16:10	龚浩然 (中南大学)	Interface properties of Pd/TiAl membranes for hydrogen permeation
16:10-16:25	茶歇	
7月6日下午, 计算材料学分场, 邀请报告 (主持人: 夏钊)		
地点: 会展中心一期2楼2号会议厅		
16:25-16:45	彭向阳 (湘潭大学)	单层和多层石墨烯在 SiC 和 Ru 表面上的几何结构和电子结构的第一性原理研究
16:45-17:05	王璐 (大连理工大学)	石墨烯氧化物的结构及其储氢特性
17:05-17:25	姜振益 (西北大学)	配位氢化物相变机制的理论研究
17:25-17:45	张立新 (南开大学)	PbS(111)与溶液界面处的超强氢键
17:45-18:05	徐艺军 (福州大学)	Coadsorption of CO and NO on the Cu ₂ O(111) surface: a periodic DFT study
18:05-18:25	杨宗献 (河南师范大学)	DFT studies on the dissociation of O ₂ on the highly active Pt-skin Pt ₃ Ni (111) catalyst
7月6日晚, 专题讲座, 地点: 城际客缘酒店17楼A会议室		
19:30-20:30	宏剑公司	计算材料软件讲座与用户答疑

7月7日上午，计算材料学分场，邀请报告（主持人：颜晓红）		
地点：会展中心一期2楼2号会议厅		
8:00-8:20	Dong Shihai (Instituto Politecnico Nacional, Mexico)	Proper quantization rule
8:20-8:40	吕劲 (北京大学)	新型分子器件设计
8:40-9:00	许爱国 (北京应用物理与计算数学所)	冲击波与多孔材料相互作用过程的模拟与分析
9:00-9:20	江建军 (华中科技大学)	计算材料学与创新人才培养
9:20-9:40	言天英 (南开大学)	计算机模拟离子液体的结构与动力学性质
9:40-10:00	李慎敏 (大连大学)	凝聚相模拟中原子点电荷的快速计算方法
10:00-10:15	茶歇	
7月7日上午，计算材料学分场，邀请报告（主持人：吕劲）		
地点：会展中心一期2楼2号会议厅		
10:15-10:35	颜晓红 (南京航空航天大学)	碳纳米结构的电磁调制
10:35-10:55	丁峰 (香港理工大学)	Growth Mechanism of Graphene and Carbon Nanotubes on Catalyst Surface
10:55-11:15	陈中方 (美国波多黎各大学)	Intriguing Properties and Promising Application of Nanographenes - From Carbon Nanoribbons to Their Inorganic Cousins
11:15-11:35	赵纪军 (大连理工大学)	Band Gap Tuning of Hydrogenated Graphene: H Coverage and Configuration Dependence
11:35-11:55	胡慧芳 (湖南大学)	Interaction of Melamine molecule with perfect and defected graphene nanoribbons

7月7日下午, 计算材料学第一分场, 邀请报告 (主持人: 许爱国)		
地点: 会展中心一期2楼2号会议厅		
14:30-14:50	贾瑜 (郑州大学)	FRIEDEL 振荡对表面偏析的影响
14:50-15:10	孙立忠 (湘潭大学)	非对称一维系统功函数
15:10-15:30	陈敬超 (昆明理工大学)	贵金属颗粒的计算模拟与实验研究
15:30-15:50	刘英 (河北师范大学)	Structural stability of endohedral silicon fullerenes
15:50-16:10	袁岚峰 (中国科技大学)	Ab initio Prediction of Amorphous B ₈₄
16:10-16:30	杨小宝 (华南理工大学)	An ideal scaling of structural stability property for group-IV nanostructures: application for C, Si and CSi magic structures
16:30-16:45	茶歇	
7月7日下午, 计算材料学第一分场, 口头报告 (主持人: 贾瑜)		
地点: 会展中心一期2楼2号会议厅		
16:45-16:57	张义权 (南京师范大学)	Strong Anisotropy Barriers of two Theoretically Modeled Cyano-Bridged Magnets [PY ₅ Me ₂] ₄ M ₄ Re(CN) ₇] ⁵⁺ (M=VII, NiII): DFT Predictions
16:57-17:09	李海鹏 (香港城市大学)	Structural transition and thermal property of silicon nanoparticles: Molecular dynamics study
17:09-17:21	黄淑萍 (香港城市大学)	Tuning the electronic and magnetic properties of ZnO nanowires by surface functionalization
17:21-17:33	蓝海平 (中国科技大学)	Stability and Magnetic Properties of Freestanding Atom Wires
17:33-17:45	缪灵 (华中科技大学)	基底对石墨烯纳米带影响的第一性原理研究
17:45-17:57	黄兵 (清华大学)	石墨稀和氮化硼边缘稳定性的研究
17:57-18:09	何海燕 (中国科技大学)	石墨烯结构裁剪和功能化的理论研究
18:09-18:21	吴建宝 (上海工程技术大学)	New 568-planner meta-crystals of IV group elements created via patterned defects
18:21-18:33	舒海波 (中科院上海技术物理所)	Nucleation mechanism and catalytic effect of Au nanoparticle on GaAs(111)B surfaces

7月7日下午, 计算材料学第二分场, 邀请报告 (主持人: 马琰铭)		
地点: 会展中心一期2楼3号会议厅		
14:30-14:50	赵明文 (山东大学)	High spin states of point defects in silicon carbide materials
14:50-15:10	林哲帅 (中国科学院理化 技术研究所)	The incorporation and exclusion of Fe impurity from the nonlinear optical crystal $K_2Al_2B_2O_7$: Ab initio Studies
15:10-15:30	王松有 (复旦大学)	Local order and dynamic properties of liquid and undercooled Cu_xSi_{1-x} alloys by <i>ab initio</i> molecular dynamics
15:30-15:50	李茂枝 (人民大学)	Structural heterogeneity and medium-range order in CuZr metallic glasses
15:50-16:10	田华 (大连理工大学)	Cu-Zr 和 Ta-Ni 二元非晶合金的第一性原理模拟
16:10-16:30	王渊旭 (河南大学)	Investigation of osmium carbides with various stoichiometries: First-principles calculations
16:30-16:45	茶歇	
7月7日下午, 计算材料学第二分场, 口头报告 (主持人: 赵明文)		
地点: 会展中心一期2楼3号会议厅		
16:45-16:57	于荣 (清华大学)	Single-crystal elastic constants based on universal linear-independent coupling strains
16:57-17:09	刘雷 (国家地震局)	橄榄石的第一性原理研究
17:09-17:21	张华磊 (瑞典皇家工学院, KTH)	Elastic properties of Fe alloys from first-principles theory
17:21-17:33	王保柱 (河北科技大学)	MgO 高 k 材料的第一性原理研究
17:33-17:45	唐涛 (表面物理与化学 国家重点实验室)	The defect properties and tritium behavior in solid tritium breeding materials from density functional theory
17:45-17:57	王广涛 (河南师范大学)	Suppression of magnetism in $SrFe_{2-x}Ru_xAs_2$: First-principles calculations
17:57-18:09	齐世飞 (山西师范大学)	Key role of oxygen vacancy in mediating ferromagnetism of Fe, Fe-Sn and Fe-Cu codoped In_2O_3 : Theory and Experiment
18:09-18:21	刘显坤 (中物院核物理与 化学研究所)	TiH_2 结构与热力学性质的理论研究
18:21-18:33	侯兆阳 (长安大学)	Kinetic details of nucleation in supercooled liquid metals: A simulation tracing study

7月6日上午, 凝聚态理论分场, 邀请报告 (主持人: 李新奇)		
地点: 会展中心一期2楼3号会议厅		
8:00-8:20	刘伍明 (中国科学院物理研究所)	Non-Abelian Josephson Effect
8:20-8:40	孙庆丰 (中科院物理所)	二维拓扑绝缘体-超导体系的 Andreev 反射
8:40-9:00	李定平 (北京大学)	高温超导涡旋态的 Ginzburg-Landau 理论
9:00-9:20	常凯 (中科学院半导体研究所)	Transport in two-dimensional topological insulators
9:20-9:40	杨师杰 (北京师范大学)	Fermionic superfluidity and spontaneous superflows in optical lattices
9:40-10:00	游建强 (复旦大学)	Quantum simulation of topological phases with quantum circuits
10:00-10:15	茶歇	
7月6日上午, 凝聚态理论分场, 邀请报告 (主持人: 孙庆丰)		
地点: 会展中心一期2楼3号会议厅		
10:15-10:35	李新奇 (北京师范大学)	Circuit QED 系统中纠缠态的量子反馈控制和稳定
10:35-10:55	傅立斌 (北京应用物理与计算数学所)	双组份玻色凝聚的关联动力学和同步化
10:55-11:15	朱诗亮 (华南师范大学)	Dirac Fermions with Cold Atoms in an Optical Lattice
11:15-11:35	陈庆虎 (浙江师范大学)	Quantum Phase Transition in the Sub-Ohmic Spin-Boson Model: Extended Coherent-state Approach
11:35-11:55	吕智国 (上海交通大学)	Does temperature favor quantum coherence of a dissipative two-state system?

7月6日下午, 凝聚态理论分场, 邀请报告 (主持人: 陈庆虎)		
地点: 会展中心一期2楼3号会议厅		
14:30-14:50	刘楣 (东南大学)	铁基超导体 $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{AsF}$ 磁阻错与涨落计算研究
14:50-15:10	姚道新 (中山大学)	铁基超导体的多轨道特性
15:10-15:30	万贤纲 (南京大学)	Electronic Structure Calculations of Magnetic Exchange Interactions in Europium Monochalcogenides
15:30-15:50	姜颖 (上海大学)	Triangular Ising antiferromagnets with quenched non-magnetic impurities
15:50-16:10	Sun Changqing (南洋理工大学)	Atomic scale energy pinning and charge polarization by lessing coordination
16:10-16:25	茶歇	
7月6日下午, 凝聚态理论分场, 邀请报告 (主持人: 张胜利)		
地点: 会展中心一期2楼3号会议厅		
16:25-16:45	方海平 (中科院上海应用物理所)	Signal transmission, conversion and multiplication by polar molecules confined in nanochannels
16:45-17:05	陈澍 (中科院物理所)	Realization of stable excited state of low-dimensional quantum gases
17:05-17:25	姬广富 (中国工程物理研究院)	含能材料的介观模拟
17:25-17:45	安忠 (河北师范大学)	有机电致发光器件中激子相关的动力学过程
17:45-18:05	姜伟 (沈阳工业大学)	普鲁士蓝类似物 $\text{A}_1\text{yA}_{2(1-y)}\text{B}$ 的相关有效场理论
18:05-18:25	方见树 (湖南工业大学)	Stability of Trapped Bose-Einstein Condensates in One-dimensional Tilted Optical Lattice Potential

7月7日上午，凝聚态理论分场，邀请报告（主持人：方海平） 地点：会展中心一期2楼3号会议厅		
8:00-8:20	钟建新 (湘潭大学)	Graphene 电声子输运性质调控
8:20-8:40	陈元平 (湘潭大学)	石墨纳米带的电子输运
8:40-9:00	张胜利 (西安交通大学)	The modulation of the de Haas-van Alphen effect in graphene by electric field
9:00-9:20	翟峰 (大连理工大学)	石墨烯中的谷过滤效应
9:20-9:40	周光辉 (湖南师范大学)	Controllable Kondo transport for a quantum dot through a side-coupled graphene
9:40-10:00	童国平 (浙江师范大学)	The Non-nearest-Neighbor Hopping in Graphene Nanoribbons
10:00-10:15	茶歇	
7月7日上午，凝聚态理论分场，口头报告（主持人：钟建新） 地点：会展中心一期2楼3号会议厅		
10:15-10:27	侯净敏 (东南大学)	Massless Dirac fermions in a square optical lattice
10:27-10:39	李玉现 (河北师范大学)	石墨烯超晶格中的量子噪声
10:39-10:51	崇桂书 (湖南大学)	Chaos in Bose-Einstein condensates
10:51-11:03	丁开和 (长沙理工大学)	具有磁性杂质的石墨烯中电荷和自旋霍尔效应
11:03-11:15	马庆敏 (河北师范大学)	Structures and magnetic ordering of Fe_nCr ($n = 1-19$) clusters
11:15-11:27	王伟芳 (北京师范大学)	铜氧化物超导体的准粒子能谱和博戈留波夫角
11:27-11:39	耿志浩 (北京师范大学)	铜氧化物高温超导体的拉曼散射研究
11:39-11:51	周详 (武汉大学)	超快激光脉冲激发 C_{60} 振动的分子动力学研究
11:51-12:03	李宗宝 (贵州铜仁学院)	脉冲强磁场环境下的有机磁性材料研究

墙报目录

(时间: 7月6日晚 20:00~22:00, 地点: 国航大厦4楼多功能厅)

序号	作者	标题
P01	黄喆煜	铜氧化物高温超导体的拉曼散射研究
P02	高国英	Novel high-pressure structures and superconductivity of Stannane
P03	程芳	Anisotropic property in semiconductor interacting quantum wires
P04	吴振华	Resonant tunneling in graphene and its nanoribbons
P05	刘羽	Tuning two electron states through the spin-orbit interaction
P06	徐紫巍	The Growth Mechanism of Peapod-Derived Double-Walled Carbon Nanotubes
P07	高峻峰	Nucleation of Graphene in CVD Growth
P08	王焕	First Principles Studies about the Multiferroism of BiCrO ₃ under High Pressure
P09	欧阳生德	A comparative investigation of Jahn-Teller effect in triangular compounds NaMnO ₂ , NaNiO ₂ & NaTiO ₂
P10	徐勇	石墨纳米结和量子点中的热输运
P11	丁宗玲	Size effect on the transport properties of carbon nanotubes
P12	张春小	氧原子边缘替位掺杂的锯齿形 GNR 的 NDR 效应
P13	张川晖	内嵌金属的硅纳米线的第一性原理计算
P14	甘立勇	Theoretical Insight of S Enhanced CO adsorption: A Comparison of CO adsorption on X/Au(111) and X/Pd(111) (X=Na, S, O, and Cl)
P15	冉琼	铍内嵌硅纳米线的理论研究
P16	牛雪莲	催化剂对 NaMgH ₃ 储氢性能影响的第一原理研究
P17	彭松林	The promotion of water to CO oxidation on Gold Clusters: A First-Principle Study
P18	欧阳滔	石墨、氮化硼纳米带的热输运性质研究
P19	伍剑明	A theoretical study of structure, electronic, and magnetic properties of Mn _{1-x} Cr _x Te system
P20	陈星源	First-Principles study of BiCo _{0.875} X _{0.125} O ₃ (X=Fe, Mn, Cr)
P21	李晟	Special electronic structures of inverse spinels LiMVO ₄ (M=Ni and Cu):a first-principles study

P22	钟标	Resonant waveguide structure enhancement for laser cooling of solids
P23	李果	范德瓦尔斯力对氢钝化表面一维苯乙烯纳米链生长的影响
P24	宋红州	First-principles calculation of the thermal properties of tin
P25	武光芬	Asymmetric Quantum Films for Hydrogen Purification
P26	李鸿	超窄无机纳米带与碳纳米管复合体系
P27	刘奇航	平行单壁碳纳米管中的负微分电阻效应
P28	覃睿	室温下基于裸 ZGNR 的巨磁阻
P29	余力立	单壁碳纳米管 pn 结在纳米尺度的反向整流效应
P30	刘宗民	Magnetism and half-metal in armchair BNC nanoribbons
P31	朱建伟	Reorientation mechanisms and pseudoelasticity of iron nanowires
P32	温源	B-C-N 三元超硬晶体的成分设计与力学特性
P33	蒋雪	Mechanical and electronic properties of B ₁₂ -based ternary crystals of orthorhombic phase
P34	张朋波	Mechanical properties and hydrogen behavior in V-Ti-Cr alloys
P35	刘立钊	Superelasticity of Carbon Nanocoils from Atomistic Quantum Simulations
P36	郑朝阳	First-principle studies on thermal decomposition behavior of FOX-7 under high pressures
P37	刘源	First-principles Study on Structural and Electronic Properties for (H ₂ O) ₃₀₋₄₈ clusters
P38	高海丽	First-principles study of Ru atoms and clusters adsorbed outside and inside Carbon Nanotubes

场地安排

会议地点

- ◆ 7月5日大会报告：星海会展中心一期2楼1号会议厅
- ◆ 7月6、7日分场报告，计算材料学：会展中心2楼2号会议厅
- ◆ 7月6、7日分场报告，凝聚态理论：会展中心2楼3号会议厅
- ◆ 7月6日墙报（20:00-22:00）：国航大厦酒店4楼多功能厅
- ◆ 7月6日宏剑公司讲座（19:30）：城际客缘酒店17楼A会议室

用餐地点

- ◆ 7月4日至7月8日午餐（12:00开餐）与晚餐（18:30开餐）：
国航大厦酒店3楼凤凰厅、4楼多功能厅
- ◆ 7月5日晚宴（18:30-20:00）：大连之夜宴会厅2楼A厅

星海广场周边地图

