

(一) 分会场 11：稀土等强关联材料基因工程

会议主席： 种晓宇 教授 昆明理工大学

高兴誉 研究员 北京应用物理与计算数学研究所

王 毅 教授 西北工业大学

刘 斌 教授 上海大学

卜文刚 研究员 国防科技创新研究院

联 系 人： 干梦迪 手机：15912445254 邮箱：ganmengdii@163.com

会议议题： (1) 稀土材料计算设计；(2) 稀土材料数据库；(3) 稀土材料机器学习；(4) 强关联材料理论计算方法

报告日程安排

会议地点： 云安会堂 601（六层）

5 月 19 日 上午 09:00-11:50	
主持人：	高兴誉研究员
09:00-09:20 邀请报告	极端条件稀土材料 靳常青研究员，中国科学院物理所
09:20-09:40 邀请报告	知识赋能-数据驱动低热导稀土锆酸盐高熵氧化物的智能设计 王毅教授，西北工业大学
09:40-10:00 邀请报告	稀土化合物与团簇全局最优结构搜索算法与程序研究 张阳阳助理研究员，南方科技大学
10:00-10:20 邀请报告	稀土微观电子结构的物性关联 孟君玲讲师，吉林师范大学
10:20-10:30	茶歇
主持人：	靳常青研究员
10:30-10:50 邀请报告	基于极端材料集成计算平台 ProME 的可压缩性合金组分优化 高兴誉研究员，北京应用物理与计算数学研究所
10:50-11:10 邀请报告	DFT+X 方法关联强度 U/J 评估与模拟 王越超助理研究员，北京应用物理与计算数学研究所
11:10-11:30 邀请报告	熵控含能稀土储氢合金的高通量设计 卜文刚助理研究员，军事科学院国防科技创新研究院
11:30-11:50 口头报告	基于高通量第一性原理计算筛选具有热障涂层前景的稀土铝酸盐 褚凯丽，上海大学
5 月 19 日 下午 14:00-17:00	

主持人:	王毅教授
14:00-14:20 邀请报告	第一性原理计算 Yb-Sb 体系的热力学性质 种晓宇教授, 昆明理工大学
14:20-14:40 邀请报告	CO ₂ 电化学还原及耦合低碳烷烃制高值化学品研究 田冬讲师, 昆明理工大学
14:40-15:00 邀请报告	第一性原理计算稀土掺杂 WC 钢铁基复合材料界面特征及力学性能 张飞讲师; 昆明理工大学
15:00-15:20 口头报告	基于机器学习的多组元稀土双硅酸盐的成分设计与相形成能力研究 范芸, 哈尔滨工业大学
15:20-15:40	茶歇
主持人:	种晓宇教授
15:40-16:00 邀请报告	稀土元素掺杂对 Gd ₂ Zr ₂ O ₇ 热物理性能影响的第一性原理研究 王星奇, 中国有研科技集团有限公司
16:00-16:20 邀请报告	机器学习模型元素泛化能力探究 何京津讲师, 昆明理工大学
16:20-16:40 口头报告	稀土钽酸盐超低热导率的起源 干梦迪, 昆明理工大学
16:40-17:00 口头报告	基于第一性原理计算的 TiB ₂ 陶瓷增韧的合金化策略 林洋, 昆明理工大学

墙报安排

时间: 5 月 18-19 日报告间隙自由交流

地点: 分会场会议室

联系人: 干梦迪

姓名 (单位)	墙报题目
薛桂宇	点缺陷对于 Y _{3-x} A _x NbO ₇ (A=Ca, Mg, Al, In; x=0.05, 0.1) 萤石陶瓷热-氧传输性质的影响机制研究