

# 关于参加新能源材料计算研讨会的邀请函

尊敬的同学/老师：

您好！

为了更好地帮助广大科研领域人才掌握新能源材料计算，材料人网所属的北京紫荆高科科技有限公司于2018年10月27日至29日在长春举办为期3天的新能源材料计算研讨会，相关事项如下：

## 一、 研讨会主旨

旨在帮助同学、老师们掌握科研领域使用频率极高的新能源材料计算，以便在今后的科研工作中得以应用。

## 二、 会议安排

第一节：光伏材料与异质结。

- 1.1 光伏材料原理与有机无机概念
- 1.2 分子内电荷转移与分子间电荷转移
- 1.3 实例：D- $\pi$ -A 结构分子的电子结构性质
- 1.4 实例：D- $\pi$ -A 分子的结构拓扑

第二节：二维材料基本性质

- 2.1 能带与声子谱
- 2.2 界面电荷转移
- 2.3 体内载流子输运
- 2.4 实例：TiO<sub>2</sub> 的簇模型与 Slab 模型及其吸附结构
- 2.5 实例：钙钛矿模型与体相构效关系

### 第三节：染料敏化太阳能电池

#### 3.1 附着基团与染料主辅结构

#### 3.2 电荷转移动力学

#### 3.3 共敏化与材料功函数

#### 3.4 实例：D-Pi-A 染料与 TiO<sub>2</sub> 基激态相互作用

#### 3.5 实例：符合 DSSC 体系的理论表征

### 第四节：有机太阳能电池

#### 4.1 主客体电荷转移与分离

#### 4.2 载流子迁移率与 pn 结

#### 4.3 能量转移

#### 4.4 实例：有机体系载流子迁移率计算

#### 4.5 实例：能量转移过程的理论分析

### 第五节：钙钛矿太阳能电池：

#### 5.1 肖特基系统的概念衍化

#### 5.2 有序与无序

#### 5.3 钙钛矿结构拓扑

#### 5.4 实例：钙钛矿的缺陷与掺杂

#### 5.5 实例：二维与三维钙钛矿的电子结构特征

### 第六节：能源材料的理论模拟

#### 6.1 光伏材料的理论设计

#### 6.2 热电材料的理论设计

#### 6.3 压电材料的理论研究

6.4 材料内部电磁场效应

6.5 二维钙钛矿材料

6.6 有机发光材料设计

6.7 材料的逆向设计思路

注： 请自备笔记本电脑。培训过程中提供测试账号运算。

### 三、 会议时间

注册报道 10月27日 8:30-9:00

会议时间 10月27-29日 9:00-12:00; 13:30-17:00

### 四、 嘉宾简介

吉林大学白老师，吉林大学博士、京都大学和港科大博后。研究方向主要是有机太阳能电池和染料敏化太阳能电池材料计算模拟。主要研究工作发表在AEM、JMCA和JMCC上，迄今发表sci论文一百余篇。

吉林大学贾老师，德国乌帕塔尔大学博士，慕尼黑工大博士后。主要研究领域为二维材料光电性质，以及光电、热电、压电材料的计算设计等。积累了表面属性和体材料研究的丰富经验。

哈工大南老师，中科院化学所博士，加州州立大学博士后，欧盟玛丽居里学者。在JMCA, JCP和JPC杂志发表了杂化光电材料系列研究成果。近期AEM杂志上发表的钙钛矿材料的创新计算研究被选为高引论文。

### 五、 会议收费标准

类别	价格
早鸟价（9月15日前）	2200元

正常价	2400 元
团报价（3 人及以上）	2200 元

注 1：本次培训可开具发票

注 2：本次培训费用不包含食宿，请自行解决。

注 3：材料人往期线下培训学员报名享受团报价

## 六、会议地点

长春市吉林大学前卫门校区附近（近长春火车站），具体地点另行通知

## 七、缴费方式

1：支付宝转账至公司企业支付宝 icailiaoren@163.com

2：联系客服寄送发票，对公转账，相关信息如下：

公司名称：北京紫荆高科科技有限公司

税号：91110108MA007CQ89K

地址：北京市海淀区永澄北路 2 号院 1 号楼 B 座 1 层 261 号

电话：010-82810279

开户行：中国工商银行股份有限公司北京东升路行

账号：0200006209200340717

企业支付宝账号：号：icailiaoren@163.com

## 八、联系方式

邮件：kefu@cailiaoren.com

电话：010-82810279

