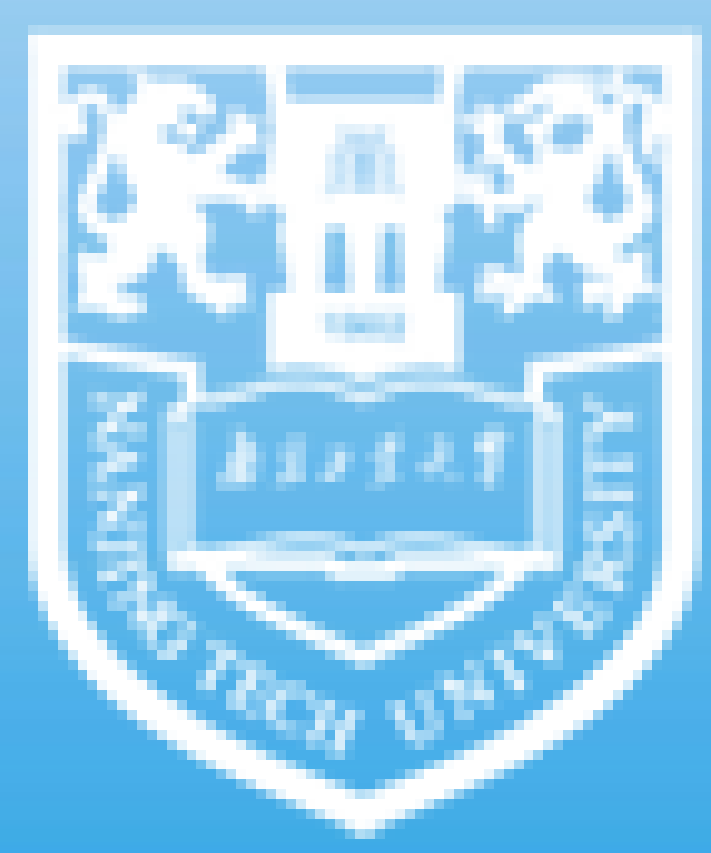




学术报告

报告题目：基于第一性原理方法揭示材料结构相变及催化机理

报告人：刘立仁

报告人单位：数理科学学院 物理系

报告时间：2024年12月19日（星期四）14:00

报告地点：笃行楼316

报告人简介：

刘立仁，博士毕业于中国科学技术大学微尺度国家实验室凝聚态物理专业，师从杨金龙院士。主要从事凝聚态物质的理论计算工作，在零维纳米团簇领域提出了“等同超原子”、“杂化超原子网络”等概念，最终形成了揭示金属团簇组装规律的新唯相理论——《超原子分子理论》。在非晶催化、表面催化、异质结催化以及二维材料生长动力学方面均有代表性研究成果。主要研究论文发表于Nature Catalysis, Nano Letters, Small, Science Advance, Chem. Eng. J., Nanoscale等。

报告摘要：

第一性原理计算是当前揭示材料内禀电子结构性质和反应过程能量变化的重要手段，被普遍应用于物理、材料、化学乃至生物医药等众多领域。报告首先以零维纳米团簇Au₁₈SR₁₄为例，介绍如何通过理论计算确定团簇结构，并揭示团簇结构在水溶液中的可逆异构化机理。其次，分享报告会同实验合作者在非晶催化、表面催化和异质结界面工程等方面的几个近期工作。最后，给出报告人近年在配体金属团簇、催化领域的总结和思考，以及第一性原理计算当前面临的机遇和挑战。