



新型纳米催化剂的多尺度理论设计



报告人：周苗 教授

报告时间：2019年10月25日 15:20至16:55

报告地点：工物馆 422

内容简介：

纳米催化剂是纳米科学与技术的一个重要分支，它具有独特的表面特性和量子尺寸效应，其催化活性和选择性都大大高于传统催化剂。针对新型纳米催化剂的设计与调控，仅靠实验是不够的，近年来基于计算机的大规模理论计算发挥着关键作用。这里，我们首先简要介绍几种计算材料物理化学性质的方法基础，主要包括基于密度泛函理论的第一性原理、紧束缚近似、分子动力学和动力学蒙特卡洛模拟。以常见二维材料为例，研究石墨烯负载金属纳米催化剂的几何、电子结构性质及对一氧化碳氧化的催化性能，研究金属硫族化合物催化析氢反应上的潜在应用，并探索纳米催化剂的多场调控。结合机器学习方法，理论计算将在解释实验结果、指导未来实验方面凸显优势。

报告人简介：

周苗，北京航空航天大学教授、博士生导师，国家特聘青年专家。2008年重庆大学电子信息科学与技术学士，2012年新加坡国立大学物理学博士，2012-2015年美国犹他大学材料科学与工程系博士后，先后在香港大学、德国洪堡大学和马普学会弗里茨-哈伯研究所访问研究。一直致力于低维材料与器件，特别是材料的表面与界面的多尺度理论计算研究。在PNAS、PRL、JACS、Nano Lett.等杂志上发表论文50多篇，他引近3000次。研究成果被Science Daily、Phys. Org、科技日报、人民网等国内外媒体广泛报道。担任J. Phys. Condens. Matter.顾问委员，是Nat. Commun.、PRL、AM、Nanoscale等物理、化学、材料领域30多个杂志的常任期刊审稿人。