



能源催化材料的理论设计



报告人：张亮 助理教授

报告时间：2021年12月2日 13:30-15:00

报告地点：英士楼 201

腾讯会议：775 773 843

内容简介：

早期化学和材料研究主要依靠实验探索。近20多年来，借助计算机能力的快速提高和理论与计算化学方法的发展，通过量子化学方法计算研究催化材料性质和催化反应机理，极大地加深了人们对催化过程的认识，加速了新型催化材料的开发。另一方面，核壳结构是最常见的多组分纳米材料组装方案之一，能有效地实现内核材料和壳层材料的优势互补。对核壳材料进行合理组合可以使其展现出对应单组分材料所无法比拟的性能，也为研究催化材料构效关系提供了很好的模型体系。报告人首先将为大家介绍一些计算催化中的基本概念，然后向大家汇报本人过去在以下两方面的工作：

- (1) 金属合金纳米催化剂的理论设计；
- (2) 金属氧化物核壳材料的调变机制；

上述工作在分子原子尺度建立了不同类型多元催化材料的构效关联模型，为相关纳米催化材料的设计提供了新思路。本报告将重点介绍碳中和的原理以及生物质和二氧化碳的催化转化的前沿理论与技术。

报告人简介：

张亮博士，2009年本科毕业于中国科学技术大学化学物理系。2014年，在美国德克萨斯大学奥斯汀分校化学系取得物理化学博士学位，师从Graeme Henkelman教授。之后，分别在美国斯坦福大学Nørskov课题组和宾夕法尼亚大学Vojvodic课题组开展博士后研究。2018年起在美国康涅狄格大学化学与生物分子工程系担任助理教授开展独立科研工作。2019年8月全职回国，在清华大学燃烧能源中心/车辆与运载学院担任助理教授，特别研究员。主要研究方向为理论与计算催化，能源与环境材料理论设计，加速分子反应动力学方法发展等。