

武汉物数所理论交叉学术交流系列报告

(第一〇九期)

配体保护金团簇的结构规则和性质的理论模拟

裴勇 教授

湘潭大学

2014年12月01日(周一) 上午10:30-12:00

频标楼4楼报告厅

报告人简介: 裴勇, 男, 1978年生。2001年毕业于湘潭大学化学系, 2006年南京大学理论与计算化学研究所博士毕业。2006-2010年在美内不拉斯加大学-林肯分校从事博士后研究, 2010年10月进入湘潭大学化学学院工作。2014年获得国家自然科学基金优秀青年基金。现任湘潭大学化学学院教授、博士生导师。主要从事团簇等低维纳米材料理论计算化学研究工作。在JACS, ACS Nano等期刊上发表论文50余篇, 论文被他人引用800余次。



报告摘要: 原子团簇, 简称团簇, 是由几个乃至上千个原子(或分子)组成的相对稳定的聚集体, 具有许多既不同于单个原子分子, 又不同于大块固体的奇特性质, 如幻数稳定性和几何非周期性, 异常的催化活性, 量子尺寸效应等。从80年代起, 团簇研究引起国际学术界和产业界的广泛重视。我们采用理论计算化学手段, 结合团簇结构搜索方法, 针对一类由硫醇配体保护的纳米金团簇的结构开展了理论探索研究, 总结了此类新型后过渡金属团簇的成键和结构规则, 并提出了团簇的结构规律以及“超原子”团簇的理论解释。结果显示硫醇配体保护的结构规则和内在的电子结构性质与传统的过渡金属簇合物有很大的区别。研究结果有望为人们理解配体保护金团簇的形成机理、结构演化方式和内在的电子结构性质等提供一些理论的指导和依据。

主办单位:武汉物数所理论与交叉研究部