

【学术报道】从团簇的结构优化到逆向设计

2021年4月16日下午,大连理工大学三束材料改性教育部重点实验室主任、大连理工大学物理学院院长赵纪军教授应邀在我校南望山校区东区新综合楼A1104为数学与物理学院的师生作了题为《从团簇的结构优化到逆向设计》的学术报告。学术报告会议由数学与物理学院卢成教授主持。





在本次报告中，赵纪军教授从团簇的基本概念、团簇科学的基本问题、核心问题、团簇结构的确定以及团簇领域目前所面临的困难与挑战几个方面，仔细地介绍了团簇领域的一些基础知识与研究难点问题。在此基础上，赵纪军教授详细介绍了团队基于遗传算法(GA)编制的结构预测软件包(CGA)。该程序能高效确定团簇的基态结构、重现团簇的谱学特征。同时，赵纪军教授还分享了对新奇笼形团簇的理论设计的一些思路并以 Pd-S 团簇的光催化剂为例，探讨了团簇逆向设计程序 IDOGA 的可靠性以及课题组的一些最新研究成果。赵纪军教授对团簇科学问题的研究过程讲解细腻、通俗易懂。师生们对报告内容十分感兴趣，积极提问。赵纪军教授对大家的问题都一一进行了详细的解答,并做了相关知识点的拓展，师生们均受益匪浅。学术报告会圆满结束。

赵纪军教授，1996年南京大学物理系获凝聚态物理博士，师从王广厚院士。现任三束材料改性教育部重点实验室主任，大连理工大学物理学院院长，国务院学位委员会第八届学科评议组成员，兼任 *Advances in Physics X* 等四个 SCI 国际期刊编委。主要研究领域为低维凝聚态物理、计算材料学。发表 SCI 论文 600 余篇，总引用 20000 多次，H 因子 70，入选爱思维尔中国高被引学者。获国家自然科学二等奖 1 项、省部级科技奖 7 项。