

# 高分子科学系列讲座

高分子物理与化学国家重点实验室 中国科学院长春应用化学研究所

序 号	PS2013-09	总 序 号	PSLAB171-PS2013-09
报 告 人	邓伟桥	职 称	研究员
从事专业	物理化学		
建 议 人	王鹏	主 持 人	王鹏
报告时间	2013.06.26 下午 14:00	报告地点	本馆三楼会议室
单 位	中国科学院大连化学物理研究所		
通讯地址/邮编	大连市中山路 457 号/116023		
电 话	0411-84379571	电子邮箱	dengwq@dicp.ac.cn
出生年月	1973.10		
报告人背景	<p>邓伟桥, 男, 1973 年生, 研究员, 博士生导师。1994 年 6 月在兰州大学化学系获理学学士, 1997 年 6 月在中科院大连化物所获理学硕士, 2004 年 6 月在美国加州理工学院化学系获理学博士。2004 年 7 月至 2006 年 7 月在加州理工学院材料模拟中心任副研究员。2006 年 7 月至 2009 年 7 月在新加坡南洋理工大学任助理教授。2009 年 8 月至今在中科院大连化物所任研究员, 入选中科院“百人计划”。邓伟桥的工作特点是以多尺度计算机模拟为工具, 发展多尺度的材料特性及动力学过程的理论和数值模拟方法, 利用发展出的理论方法来设计、优化并开发出新型材料。</p> <p><b>当前研究兴趣:</b> 共轭微孔高分子的模拟与设计及应用和染料敏化太阳能电池的模拟与设计</p>		
报告题目	合理设计应用于能源与环境的有机功能材料		
内 容 摘 要	<p>应用量化计算、分子动力学等计算机模拟的方法, 我们设计了几种高效的有机功能材料, 并将其应用到能源与环境领域。首先我们利用量化计算和 Grand Canonical Monte Carlo 方法研究了锂掺杂有机分子与氢气分子的作用机理, 模拟了锂掺杂共轭微孔高分子的储氢性能, 得到了较好的计算机模拟结构。在此基础上, 我们通过实验合成了这一新型材料, 其储氢性能远远超过了其他物理吸附储氢材料, 并刷新了储氢记录[1]。其次我们利用量化计算来研究了“Salen-金属”催化转化 CO<sub>2</sub> 的机理, 并以此为基础设计与合成出 Salen-金属络合的共轭微孔高分子材料, 该材料可以在常温常压下捕获并转化 CO<sub>2</sub>[2]。最后, 我们发展了一套多尺度理论模拟模型可以仅依靠染料分子结构就能预测染料敏化太阳能电池的效率。通过此模型对染料分子的筛选, 我们设计与合成出一种新型锌卟啉染料, 该染料比现有最优染料 YD2-o-C8 在同等条件下具有更好的效率[3]。</p> <p>Reference:</p> <p>[1] Li A, Lu RF, Wang Y, Wang X, Han KL and Deng WQ* “Lithium-Doped Conjugated Microporous Polymers for Reversible Hydrogen Storage” Angew. Chemie. Int. Ed. 49, 3330-3333, 2010.</p> <p>[2] Xie Y, Wang TT, Liu XH, Zou K and Deng WQ* “Capture and Conversion of CO<sub>2</sub> at ambient conditions by a conjugated microporous polymer” Nature Comm. 4, 1960, 2013.</p> <p>[2] Sun L, Jiang L, He BF and Deng WQ* In preparation 2013.</p>		