



个人简介

简介:

1995年毕业于南京大学化学系, 2000年获南京大学博士学位。同年赴德国慕尼黑工业大学 (TU Munich) 化学系, 在U Manthe 教授和W. Domcke教授课题组从事博士后研究。2003年8月进浙江大学化学系工作。历任浙江大学副研究员、研究员、博士生导师、分子设计与应用研究所副所长。参加、主持多项国家自然科学基金项目。在Science (第一作者), Biomaterials, Biophys. J, J. Phys. Chem. J. Chem. Phys. Phys. Rev. B. 等国内外重要学术刊物发表论文多篇。Science, J. Chem. Phys. 上的系列工作被评价为“打开了精确计算多原子体系的反应速率常数”的大门 (D Clary, 英国皇家学会院士, 评论发表于C&E News, 2005)。一篇论文入选2007首届中国百篇最具影响国际论文。

发表论文\著作:

部分近期论文:

1. First principle theory of CH₄+H reaction *Science*, 306,2227-2229 2004 [Tao Wu](#), HJ Werner, Uwe Manthe
2. Accurate potential energy surface and quantum reaction rate calculation for H + CH₄ - H₂ + CH₃ reaction *J. Chem. Phys.*, 164307 2006 [Tao Wu](#), HJ Werner, Uwe manthe (入选首届中国百篇最具影响力国际论文)
3. Effect of the helicity of single-walled carbon nanotubes on the diffusion dynamics of confined water using molecular dynamics, molecular mechanics and quantum mechanical calculations *Phys. Rev. B*, IN PRESS 2008 Ying-Chun Liu, Jia-Wei Shen, Keith E. Gubbins, J Moore, [Tao Wu](#), Q Wang
4. Molecular Simulation of Protein Adsorption and Desorption on Hydroxyapatite Surfaces *Biomaterials* (Leading Opinion Paper) 2008, 29(5), 513-532 Jia-Wei Shen, [Tao Wu](#), Qi Wang, Hai-Hua Pan
5. Behavior Regulation of Adsorbed Proteins via Hydroxyapatite Surface Texture Control *J. Phys. Chem. B.*, 2008, in press Dong, Xiuli; Zhou, Hailong; [Wu, Tao](#); Wang, Qi
6. Shield effect of silicate on adsorption of LRAP onto silicon-doped hydroxyapatite (100) surface *Biomaterials*, 2008, in press Chen Xin, [Wu Tao](#), Wang Qi, Shen Jiawei
7. Induced stepwise conformational change of human serum albumin on carbon nanotube surfaces *Biomaterials*, 2008, 29, 3847 Jia-Wei Shen, [Tao Wu](#), Qi Wang, Yu Kang
8. Understanding adsorption and interactions of alkane isomer mixtures in isorecticular metal-organic frameworks *Chem. Eur. J.*, 13, 6187 2007 Li Zhang, Qi Wang, [Tao Wu](#), Ying-Chun Liu
9. Understanding Adsorption-Desorption Dynamics of BMP-2 on Hydroxyapatite (001) Surface *Biophys. J.*, 93, 750-759 2007 Xiuli Dong, Qi Wang, [Tao Wu](#), Haihua Pan
10. Adsorption of Leucine-Rich Amelogenin Protein on Hydroxyapatite (001) Surface through -COO- Claws *J. Phys. Chem. C*, 111(3), 1284-1290 2007 Xin Chen, Qi Wang, Jiawei Shen, Haihua Pan, [Tao Wu](#)

工作研究领域

研究方向: 研究领域包括第一原理动力学及其在界面过程中的应用, 化学信息学, 生物信息学, 化学/化工行业软件研发等。具体内容如下: 1. 发展通用方法, 解决精确计算多原子体系的反应速率常数问题。发展实用的速率常数近似计算新方法, 使得对Ni、Cu等金属催化剂上的近室温表面过程模拟可以有效开展以应用于低能耗绿色催化剂的设计。为满足学术和工业界

姓名: 吴韬
单位: 化学系
职称: 研究员 (自然科学)
我的主页共被访问了1767次

栏目

▶ 基本信息

链接

的需要，将相关成果转化成为通用动力学软件包(Dynamol)。 2. 在蛋白质/界面吸附和蛋白质相互作用的分子场动力学理论、动力学体系的网格计算、高维数据表达与分析等方面发展新方法。将这些动力学方法应用在绿色分离材料设计，释药材料设计，计算蛋白质组学和计算机辅助药物动力学(In silicon ADMET)等新领域。 3. 理论与实验结合，研究以PVD,CVD为代表的纳米级界面处理技术在绿色催化膜、绿色分离材料、释药材料、生物友好材料、能源材料等领域的作用机理、计算机辅助设计、工艺和应用。

联系方式

电话: 13073625769

电子信箱: tao_wu@zju.edu.cn