



当前位置：首页 >> 研究队伍

姓名：刘耘 性别：男  
 职称：研究员 学历：博士  
 电话：86-851-5890798 传真：86-851-5891664  
 Email：Liuyun@vip.gyig.ac.cn 邮编：550002  
 地址：贵阳市观水路46号



#### 简历：

- 1986.09—1990.07 北京大学，地球化学专业，获学士学位
- 1992.09—1995.08 中国科学院地球化学研究所，矿物学专业，获硕士学位
- 1997.08—2002.05 美国纽约州立大学石溪分校，地球化学专业，获博士学位

#### 工作经历：

- 1990.09—1995.08 中国科学院地球化学研究所，研究实习员
- 1995.09—1997.08 中国科学院地球化学研究所，助研
- 2002.06—2004.05 美国马里兰大学化学系理论化学组，博士后
- 2004.06—2005.06 美国弗吉尼亚理工大学（或称弗吉尼亚多技术研究所）地球科学系，博士后
- 2005.06—现在 中国科学院地球化学研究所“百人计划”研究员、博士生导师

#### 研究方向：

##### 1、稳定同位素基础理论

主要兴趣集中在对稳定同位素地球化学核心基础问题的研究上，包括：1) 对核心平衡分馏理论的改进，提供包括振动激发态、内转子、振转耦合、量子转动等一系列校正，使超越简谐近似的同位素平衡分馏计算广泛应用于特定同位素体系（如H、Li、B和clumped isotopes等）；为新兴稳定同位素方向（如Clumped 同位素、微小非质量分馏、热梯度下同位素分馏等）提供急需的理论和公式支持。

##### 2、非传统稳定同位素基本分馏参数计算

提供Se、Ge、Mo、Fe、Ca、Mg等一些列非传统稳定同位素的基本平衡分馏参数。

##### 3、矿物溶解反应动力学

研究矿物溶解的分子级别机理。

##### 4、硅酸盐熔体挥发份

研究含挥发份硅酸盐熔体的物种和局部结构。

#### 承担科研项目情况：

作为课题负责人的主要科研项目：

- 1) 2010年国家自然科学基金面上项目1项(41073015)，项目名称“重要地质体系氧同位素质量分馏线位置的理论计算”：(2010—2013)（进行中）
- 2) 中国科学院重要方向项目1项(KZCX2-EW-103)，项目名称“稳定同位素地球化学几个前沿方向的理论建设”：(2010—2013)（进行中）
- 3) 2007年国家自然科学基金面上项目1项(40773005)，项目名称“溶液中Fe同位素平衡分馏系数的量子化学计算”：



#### 通知通告

- 关于填报2012年部门预算、政府采购...
- 2011年地球化学研究所暑期学校录取名单
- 关于参加“国家的科学院，人民的科...
- 关于推荐第12批博士服务团成员候选...
- 关于推荐第八届青藏高原青年科技奖...
- 关于召开我所新增副所级领导干部任...
- 关于我所2011年度岗位聘用工作评审...
- 关于2011年度岗位聘用工作的通知
- 地球化学研究所财务报销指南
- 关于推荐首批“中国科学院青年创新...
- 万泉百人计划择优申请公示
- 地球化学前沿领域学术研讨会一号通知
- 肖保华、李晓峰百人计划择优申请公示



#### 站内搜索

 


#### 热门新闻

- 徐匡迪主席贵阳作“依靠科技进步 促...
- 我所完成2011年度上半年各实验室招...
- 国家863计划重点项目“月表物质微波...
- 地球化学研究所与云南省环境保护厅...
- 地化所工会继续保持“贵州省直机关...
- 昆明分院基建专项巡视组到地球化学...
- 中科院资环局副局长冯仁国一行到普...
- 2012年招生导师备案通知
- 李世杰书记被评为中国科学院优秀党...
- 地化所合唱团获贵州“省直机关纪念...
- 我所成功举办“庆祝中共建党90周年...
- 地化所开展“七一”走访慰问老党员...
- 地化所第八届职工运动会胜利召开



4) 2006年国家自然科学基金面上项目1项 (40672033), 项目名称“酸性条件下石英溶解分子机理的计算量子矿物学研究”：(2006—2009) (已结题)

5) 中国科学院“百人计划”项目1项(引进国外杰出人才类), 项目名称“稳定同位素平衡分馏的量子化学计算”:(2006—2010) (已结题) 终期评估优秀

6) 1997年国家自然科学基金青年基金项目1项 (49601012), 项目名称“伊利石钾素释放的量子化学静电势计算研究”:(1997—2000) (已结题)

7) 1993年贵州省自然科学基金面上项目1项, 项目名称“金沙伊利石的高温性质及农业应用的可行性”:(1993-1995) (已结题)

**专家类别:**

中国科学院百人计划入选者

**职务:**

**社会任职:**

? 中国矿物岩石地球化学学会理事 (2009—2014) ? 中国矿物岩石地球化学学会 矿物物理及矿物结构专业委员会委员、实验矿物岩石地球化学专业委员会委员、工艺矿物学专业委员会委员 (2009—2014) ? 矿床地球化学国家重点实验室学术委员会委员

**获奖及荣誉:**

1) 中国矿物岩石及地球化学学会第十一届侯德封青年科学家奖 (2006年)

2) 中国科学院“百人计划”终期评估优秀完成者 (2010年)

3) 第四届贵州省优秀科技工作者 (2011年)

**代表论著:**

代表性SCI论文 (作为第一或通讯作者) :

Li, X.F. and Liu, Y.\* (2011) Equilibrium Se isotope fractionation parameters: A first-principles study. *Earth and Planetary Science Letters*, 304, 113-120.

Liu Q., Tossell J. A. and Liu, Y.\* (2010) On the proper use of the Bigeleisen-Mayer equation and corrections to it in the calculation of isotopic fractionation equilibrium constants. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 74, 6965-6983.

Li, X.F. and Liu, Y.\* (2010) First-principles study of Ge isotope fractionation during adsorption onto Fe(III)-oxyhydroxides surfaces. *Chemical Geology*, 278, 15-22.

Li, X.F., Zhao, H., Tang, M. and Liu, Y.\* (2009) Theoretical prediction for several important equilibrium Ge isotope fractionation factors and the geological implication. *Earth and Planetary Science Letters*, 287, 1-11.

Liu, Y., Olsen, A. A. and Rimstidt, J. D. (2006) Mechanism for the dissolution of olivine series minerals in acidic solutions. *American Mineralogist*, 91, 455-458.

Liu, Y. and Tossell, J.A. (2005) *Ab initio* molecular orbital calculations for boron isotope fractionations on boric acids and borates. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 69, 3995-4006.

Liu, Y., Nekvasil, H. and Tossell, J.A. (2005) Explaining the effects of T-O-T bond angles on NMR chemical shifts in aluminosilicates: A natural bonding orbital (NBO) analysis. *Journal of Physical Chemistry A*, 109, 3060-3066.

Liu, Y., Tossell, J. A. and Nekvasil, H. (2004) A theoretical study of structural factors correlated with  $^{23}\text{Na}$  NMR parameters. *American Mineralogist*, 89, 1314-1322.

Liu, Y. and Tossell, J. (2003) The possible Al-F bonding in F-bearing aluminosilicate glasses: from *ab initio*  $^{19}\text{F}$  NMR calculation study. *Journal of Physical Chemistry B*, 107, 11280-11289.

Liu, Y. Long, H. B. and Nekvasil, H. (2002) Water dissolution in albite melts: constraints from *ab initio* NMR calculations. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 66, 4149-4163.

Liu, Y. and Nekvasil, H. (2002) Si-F bonding in aluminosilicate glasses - inferences from *ab initio* NMR calculations. *American Mineralogist* 87, 339-346.

Liu, Y. and Nekvasil, H. (2001) *Ab initio* studies of possible fluorine-bearing four- and five- coordinated Al species in aluminosilicate glasses. *American Mineralogist* 86, 491-497.

**国际会议口头报告**

**Yun Liu**, Qi Liu and John A. Tossell. Equilibrium isotope fractionation calculation beyond harmonic level. 2011 ACS National Spring Meeting, Anaheim, CA. (**Invited talk** 40 minutes)

**Yun Liu** and Huiming Bao. Theoretical determination of O and S isotope fractionations between gypsum and aqueous sulfate. 2009 American Geophysical Union Fall meeting, EOS, Transactions, 90(52), B22B-08. (**talk**)

**Yun Liu** and Xiaobin Cao. Re-thinking of the isotope mass-independent fractionation (MIF) definition. 2009 Swiss 19th Annual V.M. Goldschmidt Conference. (**talk**)

**Yun Liu.** Theoretical study on the mechanism of the removal of Mo from seawater in oxic environment. 2008 Canada 18th Annual V.M. Goldschmidt Conference. ([talk](#))

**Yun Liu** and Mao Tang. Iron isotopic fractionations between species in solution – from ab initio quantum chemistry calculations. 2006 Australia 16th Annual V.M. Goldschmidt Conference.. ([talk](#))

**Yun Liu**, Mao Tang and John A. Tossell. The boron isotopic paleo-pH indicator- a theoretical re-evaluation. Beijing 7th International Symposium on Environmental Geochemistry. ([talk](#))

**Yun Liu**, J. D. Rimstidt and G.V. Gibbs, A Theoretical Study on the Dissolution Mechanisms of Forsterite. 2004 American Geophysical Union Fall meeting. ([talk](#))

**Yun Liu** and John Tossell, Ab initio molecular orbital calculations for boron isotope fractionations on boron acids and borates. 2003 American Geophysical Union Fall meeting, EOS, Transactions, F1634. ([talk](#))

**Yun Liu** and Hanna Nekvasil, Water dissolution in albite melts: constraints from ab initio NMR calculations. 2002 Glass & Optical Materials Division Fall Meeting of the American Ceramic Society. ([talk](#))

**Yun Liu** and Hanna Nekvasil, Is there Si-F bonding in aluminosilicate glasses? Inferences from ab initio NMR calculations. 2000 American Geophysical Union Fall meeting, EOS, Transactions, F1328. ([talk](#))



版权所有 Copyright 2001-2009 中科院地球化学研究所, All Rights Reserved .  
黔ICP备050000591号 办公室电话:0851-5895095 电子邮件:bgs@vip.gyig.ac.cn