

科学研究 学术动态

[学术动态 \(/Scientific/news.html\)](#)

[自然科学 \(/Scientific/natural.html\)](#)

[社会科学 \(/Scientific/social.html\)](#)

[研究机构 \(/Scientific/institute.html\)](#)

[南京师大学报 \(http://xuebao.njnu.edu.cn/\)](http://xuebao.njnu.edu.cn/)

【学术报道】中科院田子奇研究员来我校学术交流

应南京师范大学化学与材料科学学院和江苏省物质循环与污染控制重点实验室邀请，中国科学院宁波材料技术与工程研究所田子奇研究员于2018年11月5日来我校化科院进行学术交流。

田子奇，研究员，博士，博导，中国科学院“百人计划”（C类），宁波市“3315计划”创新个人，中科院宁波材料技术与工程研究所“团队人才”。田子奇研究员的研究方向包括采用多尺度模拟方法，设计预测用于分离的先进膜材料、多孔材料以及离子液体复合材料；同时广泛与环境、化工、生物课题组开展合作，采用计算化学方法深入理解复杂体系中的化学反应过程。近五年共计发表SCI论文近50篇，其中以第一或通讯作者在Adv. Mater.、Nano Lett.、J. Phys. Chem. Lett.、Chem. Mater.、ACS Appl. Mater. Interfaces等期刊发表论文13篇。

田子奇研究员首先在化育楼226会议室做题为“先进分离材料的理论设计与模拟”的学术报告。报告由杨朕副教授主持，来自化科院各相关专业的教师和学生五十余人参加了本次学术报告会。



(http://www.njnu.edu.cn/wzattach/t_091626_936825.jpg)

田子奇研究员首先简单介绍了包括量子力学、分子动力学、巨正则蒙特卡洛模拟等涵盖多种尺度的模拟方法，然后介绍了模拟方法用于分离膜材料、多孔材料以及离子液体复合材料的系统研究。他首先从重要官能团出发，通过高精度量子力学计算，考察了若干典型的具有较强二氧化碳吸附能力的官能团，提出了含氮无定形材料中氮掺杂位点的稳定性和性能之间的相互关系；进而具体研究了一类具有优异二氧化碳吸附能力的金属骨架化合物，指出可以通过分割吸附位点的策略提高吸附剂的吸附性能；同时根据对官能团的认识设计了一系列含有氮/氧杂环的聚拓展卟啉二维膜，根据分子动力学模拟，预测其能够高效进行燃烧后二氧化碳的分离；此外，他还从理论上设计了一种离子液体/多孔石墨烯复合材料，分子模拟结果显示，通过涂布离子液体，具有较大孔径的超薄膜也具有类似分子筛体系的出色气体分离性能。报告结束后，田子奇研究员与在场师生展开了深入的交流。报告会在热烈的掌声中顺利结束。

报告会结束后，田子奇研究员来到化育楼，参观了应用化学专业相关课题组实验室，并在化育楼111室与相关师生围绕“理论计算在环境功能材料设计中的应用”这一主题，进行了一场深入座谈。座谈尾声阶段，针对同学们提出的在使用理论计算软件中遇到的实际问题，田子奇研究员还在现场进行了实际操作指导。通过此次座谈和面对面指导，同学们均受益匪浅。



(http://www.njnu.edu.cn/wzattach/t_091817_201620.jpg)

发布时间：2018/11/07



NNU · 南京师范大学 ([/index.html](#))
NANJING NORMAL UNIVERSITY



信息公开 (<http://xxgk.njnu.edu.cn/>)

Copyright © 2014 南京师范大学. All rights reserved.

苏ICP备05007121号 (<http://www.miibeian.gov.cn>)

苏公网安备 32011302320321号 (<http://www.beian.gov.cn/portal/registerSystemInfo?recordcode=32011302320321>)



([//bszs.conac.cn/sitename?method=show&id=51593BEC4FA44691E053012819ACAA00](http://bszs.conac.cn/sitename?method=show&id=51593BEC4FA44691E053012819ACAA00))