## 数学与系统科学研究院 计算数学所学术报告

报告人: 涂斌 副研究员

( 国家纳米科学中心 )

#### 报告题目:

纳米器件/材料中电输运过程的 多尺度理论模拟

邀请人: 卢本卓 研究员

报告时间: 2020 年 12 月 30 日(周三) 上午 10:00-11:00

报告地点: 数学院南楼 702 教室

### 摘要:

目前,纳米技术基础理论研究和新材料开发等应用研究都得到了快速的发展。研究纳米材料、器件的不同性质通常需要不同的理论模型。在这里,我们主要介绍几种新型的纳米器件的电化学现象和和性质,例如整流效应,光电探测,离子选择性等。 我们结合第一性原理,分子动力学以及连续模型(PNP方程),模拟了多尺度下的离子和电子的耦合的输运过程,对实验现象给出合理的理论解释。

### 个人简介:

涂斌,副研究员,国家纳米科学中心。于 2009 年在北京化工大学获得理学学士,同年进入中科院数学与系统科学研究院卢本卓研究员课题组从事计算生物的学习和研究,于 2014 年获得计算数学博士学位。随后加入国家纳米科学中心工作先后担任助理研究员,副研究员。目前主要从事于纳米材料中电子与离子输运过程的多尺度的理论计算。目前在国际期刊 Nature electronics, Science Advances, Advanced Materials, Angewandte Chemie, Chemical Communications, ACS Applied Materials & Interfaces, Langmuir 等发表文章 35 篇左右.

# 欢迎大家参加!