



# Academic Presentations in Physics

## 物理学系列学术报告

报告题目：X 射线吸收谱的理论模拟在超快动力学过程研究中的应用

报告人：王涵 研究员

报告时间：2024 年 4 月 12 日（周五）下午 14:30

报告地点：物理学院 852 报告厅

报告摘要：



解析光激发引发的电荷转移和化学键断裂过程是深入理解光电器件工作机理和光化学反应过程的关键。超快光谱能够观测到飞秒( $10^{-15}$ 秒)到皮秒( $10^{-12}$ 秒)时间尺度上原子与分子的变化，成为研究材料超快动力学行为的有力工具。随着飞秒激光、高次谐波产生技术的发展和世界各地 X 射线自由电子激光(XFEL)设施的建设，瞬态 X 射线吸收光谱 (XTAS)将成为揭示飞秒时间尺度上的超快动力学过程前所未有的细节的重要工具。由于 XTAS 中的包含大量晶体结构和电子结构的信息，从光谱中区分许多可能观察到的过渡态是一个巨大的挑战。我们理论计算了石墨烯中的载流子弛豫过程的 XTAS 光谱，也利用激发态分子动力学方法模拟了飞秒时间尺度上碘甲烷、三溴甲烷等分子被光激发后的断键过程。我们计算的 XTAS 光谱与实验结果高度符合，并提供了整个过程中材料几何结构和电子结构变化的大量细节。我们开发的理论模拟方法可以为研究超快动力学过程中电子结构变化和材料几何结构的变化过程提供详细动力学图像，并为相关的实验提供有力的理论支撑。

报告人简介：

2011 年毕业于吉林大学物理系，获物理学学士学位；

2017 年毕业于美国伦斯勒理工物理系，获物理学博士学位；

2018 年 4 月至 2021 年 9 月在美国劳伦斯伯克利国家实验室从事博士后研究；

2021 年 10 月至 2022 年 7 月在美国 SLAC 国家实验室任助理研究员；

2022 年 8 月加入上海科技大学大科学中心和物质科学与技术学院。

主要的研究方向包括开发和应用第一性原理计算方法及机器学习方法研究飞秒到皮秒时间尺度的激发态超快动力学过程，建立可以描述分子和固体材料中超快过程物理机理的“分子电影”；同时开发 X 射线光谱的模拟方法，结合 X 射线自由电子激光装置的实验结果，理论研究半导体材料和金属材料的光催化反应和光致相变等过程。已在 Nature Communications, Chemical Science, Advanced Materials, Nano Letters, The Journal of Physical Chemistry Letters 等国际重要的刊物发表了 30 余篇论文。

物理学院、物理所、光子所