



Academic Presentations in Physics

物理学系列学术报告

报告题目： f 电子对化合物几何结构和电子结构的决定机制

报告人：胡淑贤 教授

北京科技大学

报告时间：2021 年 4 月 6 日周二上午 10:00

报告地点：长安校区物理楼 8 层 852 报告厅

报告摘要：



氧化态是化学中最重要基本概念之一，是门捷列夫发现元素周期律基础。氧化态反映元素在化合物中化合状态及其在化学反应过程中电子得失情况，因而与化学物质物理化学性质密切相关。一直以来，元素周期表中化学元素稳定存在最高氧化态为+VIII。

对于镧系元素，其 $4f$ 价轨道强烈收缩，导致很难形成高氧化态化合物。大部分镧系元素常见氧化价态为+III 和+II，只有少数几个镧系元素存在+IV 价态。从上世纪 30 年代开始，就有寻求+V 氧化态稀土元素化合物努力，均未能成功。实验科学家首次获得了 PrO_2^+ 络合物以及 PrO_4 和 NPrO 等中性分子红外振动光谱，我们理论研究证实了其中 Pr 处于+V 价态，从而首次确认了稀土金属元素在化学条件下最高氧化态。在此基础上，我们对系列镧系、铈系氧化物进行系统理论研究，阐述 f 电子在化合物的几何结构和电子结构方面的决定性作用。

这一系列成果对稀土金属氧化态拓展及 f 区元素成键特性理解具有重要科学意义，也为进一步宏观合成该类高氧化态化合物及其在材料和化学反应体系中应用提供了理论基础。

报告人简介：

胡淑贤，2002.9-2009.6 在北京师范大学化学系学习，获理学学士、硕士学位；2009.3-2013.7 在中科院大学学习，获理学博士学位。先后在美国明尼苏达大学、日本早稻田大学和德国马普所从事博士后和访问学者工作。2019 年起在北京科技大学应用物理系工作。研究工作主要集中于计算化学、计算凝聚态物理中含重元素材料结构和性质的计算。

欢迎广大师生参加！

现代物理研究所，物理学院