



杨鲲

副教授

物理系教师/硕士生导师

[yangk@dlmu.edu.cn](mailto:yangk@dlmu.edu.cn)

#### 教育背景

山东大学理学博士（2007）  
山东大学理学学士（2002）  
中科院大连化物所博士后（2009）  
美国斯坦福大学 SLAC 实验室访问学者（2015）

#### 研究领域

钙钛矿型化合物表面界面的密度泛函理论研究  
有机材料合成机理的理论研究  
表面催化机理的理论研究

#### 代表性成果

- (1) First-principles calculations on the structural and electronic properties of cubic  $\text{KCaF}_3$  and  $\text{NaCaF}_3$  (001) surfaces, *Physics Letters A*, 381, 890-895, 2017. **(SCI)**
- (2) Hydrogen and nitrogen adsorption on pyrite  $\text{FeS}_2$ (100) surfaces: First-principles study, *Communications in Computational Chemistry*, 5, 78-85, 2017.
- (3) First-principles study of the cubic  $\text{CaHfO}_3$  (001) surface, *International Journal of Modern Physics B*, 30, 1650168, 2016. **(SCI)**
- (4) First-principles study on the cubic  $\text{CaSiO}_3$  (001) surface, *Communications in Computational Chemistry*, 2, 101-107, 2014.
- (5) Mechanisms and risk assessments on the N-nitration of N-Acetylhexahydro-s-triazines: Understanding the preparation

of RDX (2), *The Journal of Physical Chemistry A*, 117, 5007-5014, 2013. (SCI)

(6) An exploration of the mechanisms for the formation of 3,4-bis(4-aminofurazan-3-yl)-furoxan by density functional theory, *Computational and Theoretical Chemistry*, 997, 88-93, 2012. (SCI)

(7) Nitrosation of malononitrile by HONO, ClNO and N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: A theoretical study, *Journal of Molecular Modeling*, 17, 1017-1027, 2011. (SCI)

(8) Structural and polarization properties of short-period SrZrO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> superlattices, *Physical Review B*, 75, 224117, 2007. (SCI)

(1) 国家自然科学基金青年项目, 11304028, 钙钛矿型铁电超晶格中应变效应和尺寸效应的理论研究, 2014/01-2016/12, 已结题, 主持。

#### 代表性项目

(2) 国家自然科学基金理论物理专项, 11047110, 多铁性磁电复合材料的理论研究, 2011/01-2011/12, 已结题, 主持。

(3) 国家自然科学基金面上项目, 21473015, 自由基修饰的黄铁矿表面催化性能的研究, 2015/01-2018/12, 在研, 参与。

#### 社会兼职

辽宁省物理学会理事

#### 其他

