



## 理论物理方向 计算物理团队

## Computational Physics Team

### 团队介绍

计算物理团队成立于2018年，主要围绕分子光物理、强场超快光物理、凝聚态理论和第一性原理物性研究、储能分子设计、X射线光谱学、磁材料理论研究领域开展研究工作。课题组现有成员8人，其中教授1人，副教授3人，讲师4人。课题组现已承担国家自然科学基金6项，山东省自然科学基金项目5项。在Physical Review Letters, Physical Review B等国际著名学术期刊发表高水平论文80余篇。

### 团队成员



孙玉萍

教授 博士 硕士生导师

2010年获山东师范大学理学博士学位（原子与分子物理），2011年获瑞典皇家工学院哲学博士学位（理论化学）。主要从事分子光物理和X射线谱学研究。主持国家自然科学基金青年项目1项、山东省自然科学基金项目2项。在Nature Physics、Physical Review L、Physical Review A等国际知名期刊发表学术论文60余篇。



魏书丽

副教授 博士 硕士生导师

2018年获吉林大学理学博士学位（凝聚态物理）。主要从事新型聚氮高能材料高压结构预测理论研究工作。主持国家自然科学基金青年项目1项、山东省自然科学基金项目1项。在Chinese Journal of Physics、New Journal of Physics等国际知名期刊发表学术论文20余篇。



牛之慧

副教授 博士 硕士生导师

2019年获苏州大学理学博士学位，主要研究方向为有机储能材料的设计及理论研究工作。主持国家自然科学基金青年基金1项、山东省自然科学基金青年基金1项，中国博士后面上项目1项。在Energy Environ. Sci.、ACS Energy Lett.、Adv. Funct. Mater. 等国际知名期刊发表论文20余篇。



张春小

副教授 博士 硕士生导师

2012年获湘潭大学理学博士学位（凝聚态物理）；2017年赴美国犹他大学交流访问。从事相变工程对光电催化剂的性能调控研究和线性磁体中晶格对称性调控、磁电耦合的研究。主持国家自然科学基金青年项目、湖南省自然科学基金项目、湖南省教育厅优秀青年项目各1项。在Chemical Science, Appl. Phys. Lett., Phys. Rev. B等国际知名期刊发表学术论文70余篇。



卜坤

讲师 博士 硕士生导师

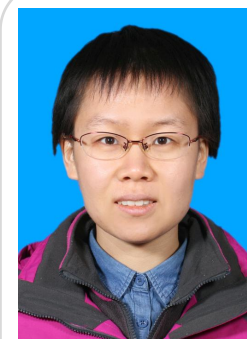
2013-2017，获郑州大学物理学学士学位。2017-2022，获中国科学院理论物理研究所博士学位，主持国家自然科学基金青年基金和山东省自然科学基金各一项，在Physical Review B等国际知名期刊发表SCI论文十余篇。



袁华

讲师 博士 硕士生导师

2015年获华中科技大学理学博士学位（光学）。主要从事飞秒激光与物质相互作用引发的强场超快光学现象的研究工作。主持国家自然科学基金青年项目1项，参与国家自然科学基金重大研究计划、面上项目以及科技部国家重点研发计划3项。在Physical Review A、Optics Letters、Optics Express等国际知名期刊发表学术论文20余篇。



王瑶

博士 讲师

2018年获南京大学理学硕士学位，2021年获中国科学院大学理学博士学位，2021-2024年于复旦大学博士后流动站工作。主要从事（阻挫）磁性材料的理论物理研究，以及磁性材料的非平衡态和动力学研究。在Nat Commun、PRB等等国际知名期刊发表学术论文10篇。



张俊荣

讲师 博士

2024年获南京理工大学博士学位。主要从事分子与二维材料X射线光谱计算的方法发展与应用。主持江苏省研究生科研与实践创新计划1项。在Journal of Chemical Theory and Computation、Applied Physics Letters、Journal of Chemical Physics、Physical Chemistry Chemical Physics等国际知名期刊发表学术论文10余篇。



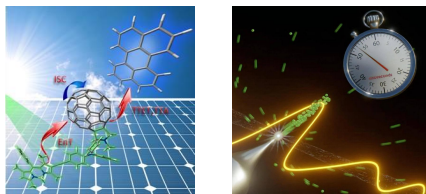
理论物理方向 计算物理团队

Computational Physics Team

研究方向

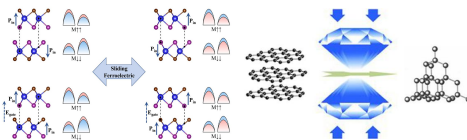
1. 分子光物理 强场超快光物理

主要研究分子体系与光辐射及电磁场相互作用的基本规律，为理解分子结构、光化学反应等提供理论基础；研究飞秒激光与物质相互作用引发的强场超快光学，探究高次谐波辐射阿秒量子调控与分子结构及动力学过程探测方面的应用。



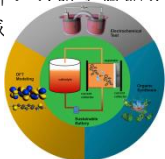
2. 基于第一性原理的凝聚态理论与物性研究

利用第一性原理，重点研究凝聚态物理中的高压结构、电子结构等问题，包括能带中的拓扑效应，以及与此相关的材料输运性质等等。



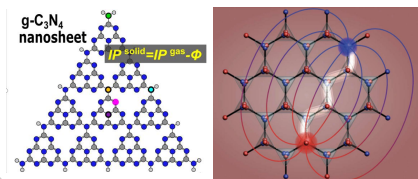
3. 储能分子工程设计与构效关系研究

主要基于分子工程设计优化物化性质进而实现创新应用研究。具体表现在通过机器学习、高通量计算进行结构筛选、结构设计结合实验验证，研究几何构型对相关物化性质的影响的关系规律。为新型储能分子构型设计和筛选提供低成本方案。



4. 二维材料结构光谱与量子磁性材料理论计算研究

研究材料的结构与光谱特性，解决二维材料在结构、表面化学、单原子催化中的实际问题。研究量子磁性材料（尤其是阻挫磁性材料）的理论建模和计算，为实验数据提供理论依据。



代表性论文

- 1.Shuping Zhang, Xiu Yin, Yue Meng, Xiaoshi Ju, Can Wang, Shuli Wei, **Yuping Sun**, Unlocking High-Performance Luminescence under Pressure: Mechanism of Emission Enhancement in Organic Cocrystal PCNTC-R,. **J. Phys. Chem. A**, 129, 23, 5011–5017(2025).
- 2.**Hua Yuan**, Shiju Chen, Feng Wang\*, Jiahang Song, Chunhui Yang, Tianxin Ou, Ru Zhang, and **Yuping Sun**, Control of attosecond-pulse helicity and ellipticity by the ionization-gating technique, **Phys. Rev. A**, 110, 063116 (2024).
- 3.Yue Meng, **Chunxiao Zhang**, Chaobo Luo, Chaoyu He, Chao Tang, and **Yuping Sun**, Tunable layer-polarized anomalous Hall effect in two-dimensional 3R-GdBrI bilayer, **Appl. Phys. Lett.**, doi: 10.1063/5.0274775. (2025).
- 4.Pengfei Zhou, Zhongjun Zhao, **Zhihui Niu**,\* et al., Unlocking Charge Transfer Limitation toward, Advanced Low-Temperature Sodium-Ion Batteries, **ACS Energy Lett.**, 2025, 10, 185–194.
- 5.Gao, Xinlei; **Wei, Shuli**; Liu, Xu; Guo, Yanhui; Chang, Qiang; Li, Da; **Sun, Yuping**; Firstprinciples calculations on structural stability and electronic properties of two pressurestabilized N-rich Sr(N5)2 compounds, **CHINESE JOURNAL OF PHYSICS**, 92: 532-541(2024)
- 6.**K. Bu** and J. T. Wang, Topological nodal line semimetal with large nodal ring in an all-sp2 hybridized carbon network formed by all-ten-membered carbon rings,**Phys. Rev. B** 107, 245111 (2023).
7. Liu, Jong-Woo Kim, **Yao Wang**, et al. Chiral spin-liquid-like state in pyrochlore iridate thin films. Xiaoran. **Nat Commun** 15, 10348 (2024).
- 8.**Jun-Rong Zhang**, Sheng-Yu Wang and Weijie Hua. On the Core Hole Effect to Valence Excitations: Tracking and Visualizing the Same Excitation in XPS Shake-up and UV-absorption Spectra. **Journal of Chemical Theory and Computation**, 20(14), 6125–6133 (2024).

代表性科研项目

| 项目类型              | 项目名称                                               | 项目负责人 |
|-------------------|----------------------------------------------------|-------|
| 国家自然科学基金青年项目      | 原子分子介质中自发和受激共振X射线拉曼散射过程研究                          | 孙玉萍   |
| 国家自然科学基金青年项目      | 氢化和氧化对石墨烯-金属平面结的输运调制                               | 张春小   |
| 国家自然科学基金青年项目      | 等性sp <sup>2</sup> -N（B、P）交叉共轭型稠杂环有机电池活性材料的设计及其机理研究 | 牛之慧   |
| 国家自然科学基金青年项目      | 高压下新型过渡金属基高能聚合氮合成路径与储能特性理论研究                       | 魏书丽   |
| 国家自然科学基金青年项目      | 碳的拓扑物性与晶体结构关系的理论研究                                 | 卜坤    |
| 国家自然科学基金青年项目      | 强场分子高次谐波的极化效应研究                                    | 袁华    |
| 山东省自然科学基金青年基金     | X射线自由电子激光参量优化机制及其传播动力学理论研究                         | 孙玉萍   |
| 山东省优秀中青年科学家科研奖励基金 | 超强X射线自由电子激光在原子分子介质中共振拉曼散射过程的动力学表征                  | 孙玉萍   |