

个人简历

姓名: 李文珂

出生日期: 1993 年 12 月 12 日 性别: 女

研究方向: 凝聚态物理, 半导体材料, 计算化学

手机: +86-13545373270

邮箱: like611@whut.edu.cn, wenke.li@chimieparistech.psl.eu



教育背景

2021 年 6 月-至今 武汉理工大学, 科研助理

2018 年 9 月-2021 年 6 月 巴黎文理研究大学, 法国 (2023 QS 世界大学排名 26)

专业: 物理化学 学位: 博士 (导师: François-Xavier Coudert 教授)

2015 年 9 月-2021 年 6 月 武汉理工大学

专业: 材料科学与工程 学位: 博士 (导师: 赵修建教授, 刘超研究员)

2011 年 9 月-2015 年 6 月 武汉理工大学

专业: 无机非金属材料科学与工程 学位: 学士

主要工作

无机非晶态基质中的半导体量子点在光电器件如激光器、白光 LED、太阳能电池等方面有广泛的应用前景, 但是量子效率相对胶体量子点较低, 限制其实际应用。从实验上对无机非晶态基质中的半导体量子点进行结构表征较困难, 因此, 我的研究方向主要是采用经典分子动力学与第一性原理计算相结合的多尺度模拟方法探究凝聚态体系中半导体量子点的微观结构与其光学性能的关系, 寻找缺陷发光的微观机理。主要学术贡献如下:

- (1) 首次在硅酸盐玻璃基质中制备了 CdTe 量子点, 探究了不同尺寸的量子点载流子的超快动力学过程, 观察到了电子被缺陷捕获, 量子点的本征发光以及缺陷发光。上述研究成果发表在 *J. Appl. Phys.* 期刊。
- (2) 探索并首次建立针对晶态-非晶态高度耦合体系的多尺度模拟方法。这一体系的建模难度较大, 一方面需要玻璃/量子点间的界面结构充分弛豫的同时量子点保持一定的结构稳定性, 另一方面玻璃的非晶态结构和量子点的晶态结构失配度较大, 得到高精度的结构较困难。此外, 量子点具有尺寸效应, 同时需考虑计算机模拟能够模拟的体系尺寸。我们发展的多尺度模拟方法在原子尺度上解释了玻璃基质中的量子点的结构缺陷来源, 提升了人们对玻璃/量子点间界面的认知。相关成果发表在 *J. Am. Ceram. Soc.*、*J. Am. Chem. Soc.* 期刊。
- (3) 采用含时密度泛函理论研究了 CdSe 量子点掺杂玻璃的激发态光学性能, 探究了非晶态基质对量子点光学性能的影响。揭示了非晶态基质中量子点的结构重构不可避免, 玻璃/量子点界面处的非桥氧以及不饱和配位的 Se 原子会导致空穴波函数的局域化, 降低空穴-电子波函数的重合度。根据我们建立的理论模型预测的材料的量子效率与实验具有较高的一致性, 为高性能的量子点掺杂玻璃的实验制备提供了理论指导, 相关工作发表在 *J. Am. Chem. Soc.* 等期刊。

➤ 个人技能

- ✓ 熟练使用各类计算化学软件如CP2K以及建模工具如VMD，掌握Linux语言，Python编程；
- ✓ 熟悉经典分子动力学、第一性原理分子动力学以及密度泛函理论等多尺度模拟方法，研究凝聚态体系几何结构及电子结构，分析其微观结构、力学性能、热力学性能、光学性能等；
- ✓ 具备独立开展课题研究的能力，具有使用飞秒激光器探测半导体量子点的瞬态吸收光谱，荧光寿命等超快动力学过程的经验，能够独立操作相关实验仪器；
- ✓ 雅思7.0分，英语流利，且具有初级的法语交流能力；具有良好的团队组织及协作能力。

➤ 学术成果

目前，在JACS等期刊发表SCI论文7篇，获得授权发明专利1项，其中以第一作者发表论文6篇。

- (1) **Wenke Li**, Kai Li, Xiujian Zhao, Chao Liu*, François-Xavier Coudert*, “Defective Nature of CdSe Quantum Dots Embedded in Inorganic Matrices”, *Journal of the American Chemical Society* 144:11296-11305 (2022). *IF=16.383, JCR Q1, 中科院1区*
- (2) **Wenke Li**, Xiujian Zhao, Chao Liu*, François-Xavier Coudert*, “Ab initio Molecular Dynamics of CdSe Quantum-Dot-Doped Glasses”, *Journal of the American Chemical Society* 142:3905 – 3912 (2020). *IF=14.612, JCR Q1, 中科院1区*
- (3) **Wenke Li**, Neng Li*, Chao Liu*, George Neville Greaves, Wee-Jun Ong, Xiujian Zhao, “Understanding the Atomic and Electronic Structures Origin of Defect-Mediated Luminescence Properties of CdSe Quantum Dots in Inorganic Amorphous Matrix”, *Journal of the American Ceramic Society* 102:5375 – 5385 (2019). *IF=3.502, JCR Q1, 中科院1区*
- (4) **Wenke Li**, Xiujian Zhao, François-Xavier Coudert*, Chao Liu*, “Effect of Calcium on the Atomic and Electronic Structures of CdSe QDs Embedded Soda-Lime-Silica Glasses”, *The Journal of the Physical Chemistry C* 126: 14283 – 14289 (2022). *IF=4.177, JCR Q2, 中科院2区*
- (5) **Wenke Li**, Xiujian Zhao, Chao Liu*, François-Xavier Coudert*, “Influence of Glass Composition on the Luminescence Mechanisms of CdSe Quantum Dot-Doped Glasses”, *The Journal of Physical Chemistry C* 125: 18916 – 18926 (2021). *IF=4.189, JCR Q2, 中科院2区*
- (6) **Wenke Li**, Wenchao Zhang, Mengling Xia, Chao Liu*, Jing Wang, “Optical Properties and Charge Carrier Dynamics of CdTe Quantum Dots in Silicate Glasses”, *Journal of Applied Physics* 121:183104 (2017). *IF=2.286, JCR Q2, 中科院3区*
- (7) Quan Xu*, Wei Cai, **Wenke Li**, Theruvakkattil Sreenivasan Sreepasad, Ziying He, Wee-Jun Ong, Neng Li*, “Photoluminescence Mechanism and Their Energy and Environmental Applications,” *Materials Today Energy* 10:222 - 240 (2018). *IF=5.604, JCR Q1, 中科院2区*
- (8) 刘超, **李文珂**, 夏梦玲, 王静, 赵志永, 张继红, 韩建军, 赵修建, 一种CdTe量子点掺杂玻璃及其制备方法, 授权专利, CN105293906.

➤ 科研项目

(1) PbS 量子点掺杂玻璃的光学性能仿真项目 (合同编号:TC20220609027), 项目来源: 华为技术有限公司, 项目经费: 87.55 万元, 项目执行时间: 2022.07.01-2023.04.30, 项目负责人: 刘超, 技术负责人:李文珂

(2) 国家自然科学基金面上项目—PbX 量子点掺杂玻璃宽光谱高效近红外发光特性研究 (项目编号: 62175192), 2022 年 1 月-2025 年 12 月, 项目经费: 60 万, 参与

➤ 国际会议

(1) Machine Learning for Glass Science and Engineering, 线上会议, 美国, 2020

(2) 25th International Congress on Glass, 口头报告, 美国波士顿, 2019

(3) Spring School in Computational Chemistry, 芬兰赫尔辛基, 2019

(4) The 2nd Winter School, Wuhan Workshop for New Researchers in Glass Science, 中国武汉, 2016

➤ 获得奖励

(1) 2023 年中国硅酸盐学会第六届优秀博士学位论文提名奖 (全国 15 篇)

(2) 2021 年武汉理工大学校优秀博士论文

(3) 2018 年国家建设高水平大学公派研究生项目

(4) 2016 年硕士研究生国家奖学金

(5) 2015 届武汉理工大学优秀毕业生