



李震宇，博士，男，1980年9月出生于湖南省沅江市。1995年进入中国科学技术大学少年班学习，1999年获物理学学士学位。随后师从杨金龙教授攻读博士学位，并于2004年在中国科学技术大学化学物理系获物理化学博士学位。现在美国马里兰大学

化学与生物化学系 Daniel Kosov 小组从事第一性原理方面的博士后研究。

在三年博士生研究期间，他用第一性原理方法对几类典型的新材料进行了物性研究，其中关于无机电子阴离子化合物方面的工作在国际上处于先进水平，被著名国际刊物 Chem. Eur. J. 邀请撰写概念性综述一篇。他还参与了与结构研究实验室侯建国教授实验研究组的理论合作研究。目前他已在 SCI 高影响因子期刊上以第一作者身份发表论文 9 篇。

他对沸石 ITQ-4 体系掺杂碱金属做了系统的研究。这些工作对 Cs 掺杂体系的电子阴离子模型给出了直接的理论依据，同时对不同碱金属掺杂的电子结构进行了比较，在理论上演示了通过施加空间几何限制实现纳米线电子结构调控的可能性。在对脱氧钙铝石的研究中，他首次引入电子局域化函数作为判据，通过成键类型分析指出该体系是一种新型的无机电子阴离子材料。他最先对 Na_xCoO_2 体系进行了点阵动力学研究，另外通过 DFT+U 方法对该体系原子位上库仑相互作用进行了仔细研究。在低维材料方面，他研究了小分子 SF_5CF_3 的电子结构和红外吸收，为估算这种气体对温室效应的贡献提供了理论依据。他还对超导材料 $\text{MgB}_2(0001)$ 表面体系进行了电子结构研究，研究结果被随后的实验工作广泛引用。

在博士生期间承担了实验室计算机系统的管理和维护工作，搭建了中国科学技术大学最早的 Linux 计算机集群并行计算系统。由于各方面的出色表现，李震宇博士获得了许多荣誉，包括求是、光华等专项奖学金，研究生论文竞赛一等奖等