

基本信息

姓名：闫丽娟

职称：副教授

所在学科：电子信息

硕士生导师：是；

Email: ljyan@gdou.edu.cn

个人简介

副教授，电子信息工程专业硕士生导师。主要从事低维纳米材料的理论计算工作。目前主持国家自然科学基金2项、省自然科学基金2项等，在国内外期刊杂志和国际、国内学术会议上发表论文20余篇。

研究方向

- (1) 团簇理论；
- (2) 分子自旋电子学；
- (3) 基于机器学习的材料结构预测；
- (4) 新能源电池材料特性分析。

科研项目

- (1) 国家自然科学基金-青年基金(12104102)，基于磁性超原子的低维磁性材料设计，2022-01至2024-12，30万元，主持。
- (2) 国家自然科学基金-理论物理专项(11847119)，基于超原子构建的金属有机框架材料：理论设计与性质模拟，2019-01至2019-12，5万元，主持。
- (3) 广东省自然科学基金-面上项目(2023A1515012286)，笼面掺杂金属硼球烯的超原子态及其杂化近自由电子带研究，2023-01至2025-12，10万元，主持。
- (4) 广东省自然科学基金-面上项目(2021A1515010038)，第一性原理研究杂化磁性团簇/金属有机框架的磁电协同特性，2021-01至2023-12，10万元，主持。

近五年发表论文

以第一作者或通讯作者在 *Inorganic Chemistry*, *Nanoscale*, *Journal of Physical Chemistry A/C*, *Results in Physics*, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, *Chemical Physics Letters*, *Chinese Physics B*, *Molecular Physics* 等期刊发表论文。

- (1)Lijuan Yan; Jun Liu*, Jianmei Shao, Yuanzheng Luo*, Wenqing Shi. Theoretical prediction of superatomic orbitals in spherical trihedral metallo-borosphenes $Be_3B_{12}^{+1/+2}$, *Results in Physics*, 2023, 44: 106162.
- (2)Lijuan Yan; Large B7 Triangles in Hollow Spherical Trihedral Metallo-borosphenes and Their Endohedral Complexes of $B_{20}TM_n$ (TM = Sc, Y; n = 3, 4): a Theoretical Characterization, *Inorganic Chemistry*, 2022, 61(28): 10652-10660.
- (3)Lijuan Yan; Xiaofeng Liu; Pengfei Gao; Xiangyang Li*; Xingxing Li*. Designing a ferrimagnetic-ferroelastic multiferroic semiconductor in $FeMoClO_4$ nanosheets via element substitution, *Nanoscale*, 2022, 14(47): 17694-17699.
- (4)Lijuan Yan; Expanded spherical trihedral metallo-borosphenes of transition-metal doped boron clusters: $TM_3B_{15}^q$ (TM = Zr, Hf; q = -1, 0, +1), *Results in Physics*, 2022, 33: 105214.
- (5) Lijuan Yan*; Jun Liu; Wenqing Shi and Jianmei Shao*. Magnetic superatoms in cage doped 13-atom trimetallic $MgnLi_{12-n}Sc$ (n = 1-8) clusters and their assembled discrete supermolecules: a theoretical prediction, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2021, 54:145005 (11pp).
- (6) Lijuan Yan; Face-Sharing Homo- and Hetero-Bitrahexahedral Superatomic Molecules $M_1M_2@Li_{20}$ (M1/M2 = Ti and W), *Journal of Physical Chemistry A*, 2019, 123(26): 5517-5524.

招生意向

对物理及交叉学科感兴趣，有科研意愿，通过英语四、六级者优先考虑。

Email: ljyan@gdou.edu.cn.