

教师基本情况简介

| | | | |
|--------|--|-------|------------|
| 姓名 | 连欣 | 出生年月 | 1989 年 1 月 |
| 学历/学位 | 博士研究生 | 职 称 | 副教授/硕士生导师 |
| 学科专业 | 化学工程与工艺 | 系（中心） | 化工系 |
| E-mail | daisylian0121@163.com | | |
| 研究方向 | 分子模拟，表面催化，微观动力学 | | |
| 通讯地址 | 重庆科技学院 K1004 | | |



基本情况（主要学习及工作经历）：

2020-2021，重庆科技学院，化学化工学院，副教授（硕士生导师）

2017-2020，重庆科技学院，化学化工学院，讲师

2011-2017，重庆大学，化学与化工学院（硕博连读）

2014-2016，美国德克萨斯大学奥斯汀分校，化学学院，联合培养博士

主要教学科研成果：

2017 年 7 月在重庆科技学院化学化工学院从事教学科研工作，承担本科《化工分离过程》、《化工过程分析与合成》、《化工仪表及自动化》等课程教学，同时指导毕业设计以及生产实训等实践教学。获得 2019 年“重庆市第五届微课比赛”市级三等奖，指导学生参加“全国化工设计大赛”获全国三等奖、西南赛区二等奖。主持“《化工仪表及自动化》课程教学模式改革与探索”校级教改项目一项，指导学生完成校级科技创新项目一项。指导校级优秀毕业设计一项。主要从事量子化学方法解析金属表面氧化机理，燃料电池催化剂及光催化剂合成设计等方面的科研工作。作为项目负责人，主持国家自然科学基金（青年基金）项目 1 项，重庆市教委科学技术项目 1 项。在 *Chem. Mater.*, *J. Chem. Phys.*, *Chem. Sci.* 等国际学术刊物上发表学术论文 20 余篇（其中一作及通讯作者发表 SCI 论文 13 篇）。

目前在研科研课题：

1. 国家自然科学基金(21903009): 金属铜初期氧化过程动力学机制的多尺度理论研究，**主持**。项目起止年月：2020 年 01 月至 2022 年 12 月。
2. 重庆市留学回国创新项目（启动）：金属铁氧化腐蚀动力学机制的多尺度理论研究，**主持**。项目起止年月：2021 年 01 月至 2023 年 12 月。

3. 重庆市教委科学技术研究项目 (KJQN201801525): 微-介尺度探究金属酸根离子抑制光阳极材料自腐蚀机制, **主持**。项目起止年月: 2018 年 09 月至 2020 年 9 月。

4. 国家自然科学基金(21801031): 一系列石墨炔及石墨二炔单元结构的合成、结构与性质研究, 主研。项目起止年月: 2018 年 09 月至 2021 年 9 月。

已发表论文 (一作及通讯):

1. Influence mechanisms of the surface morphologies on the elementary diffusion kinetics on the Cu (110) surface, X. Lian (连欣), S.Tian, S.Wang, Y. Lin, Y. Liu, Y. Li, W.L.Guo, *Computational Materials Science*, 2021, 188,110234, SCI 收录, IF=2.9.

2. Insights of the mechanisms for CO oxidation by N₂O over M@Cu₁₂ (M=Cu, Pt, Ru, Pd, Rh) core-shell clusters, **X. Lian** (连欣), W.L. Guo,* B. He, B.Yu, S.K. Chen, D. Qin, F.L.Chen, *Molecular Catalysis*, 2020, 494,111126, SCI 收录, IF=3.7.

3. Insights into the multiple effects of oxygen vacancies on CuWO₄ for photoelectrochemical water oxidation, W. L. Guo, Y. Wang, **X. Lian***(连欣), Y. Nie, S. Tian, S. Wang, Y. Zhou, G. Henkelman, *Catalysis Science & Technology* 2020, 7344-7351, SCI 收录, IF=5.7.

4. Kinetics mechanism insights into the oxygen evolution reaction on the (110) and (022) crystal facets of β -Cu₂V₂O₇, W.L. Guo, **X. Lian*** (连欣), *Catalysis Science & Technology* 2020, 10, 5129-5135. SCI 收录, IF=5.7

5. Facile growth of β -Cu₂V₂O₇ thin films and characterization for photoelectrochemical water oxidation. W.L. Guo, **X. Lian*** (连欣), Y. Nie, M. Hu, L. Wu, H. Gao, T. Wang, *Materials Letters* 2020, 258, 126842. SCI 收录, IF=3.1.

6. Comparison of O-H and C-H activation of methanol on Ni-based cluster: a DFT investigation, **X. Lian** (连欣), W.L. Guo*, B. He, Y. Lin, P. Xu, H. Yi, S. Chen, *Molecular Physics* 2019, DOI: 10.1080/00268976.2019.1685689, SCI 收录, IF=1.6.

7. A density functional study of water dissociation on small cationic, neutral, and anionic Ni-based alloy clusters, **X. Lian** (连欣), W.L. Guo*, Y. Nie, P. Xu, H. Yi, B. He, S. Chen, *Chemical Physics* 2019, 521, 44. SCI 收录, IF=1.8.

8. Calculations of oxygen adsorption-induced surface reconstruction and oxide formation on Cu(100), **X. Lian** (连欣), P. Xiao, R. Liu*, G. Henkelman*, *Chemistry of Materials* 2017, 29, 1472-1484. SCI 收录, IF=10.1

9. Kinetic barriers of the formation of oxygen chemisorbed (2 \times 1)-O reconstruction on Cu(110) surface, **X.**

Lian (连欣) , P. Xiao, R. Liu*, G. Henkelman*, *The Journal of Chemical Physics* 2017, 146,111101.

SCI 收录, IF=3.0

10. Calculations of oxide formation on low-index cu surfaces, the journal of chemical physics, **X. Lian**(连欣) , P. Xiao, S.-C. Yang, R. Liu*, G. Henkelman*, *The Journal of Chemical Physics* 2016, 145, 044711. SCI 收录, IF=3.0
11. DFT studies on Pt₃M (M = Pt, Ni, Mo, Ru, Pd, Rh) clusters for CO oxidation, **X. Lian** (连欣) , W.L. Guo, F. Liu, P. Xiao, Y. Zhang*, W.Q. Tian, *Computational Materials Science* , 2015, 96, 237-245. SCI 收录, IF=2.6.
12. A density functional theory study of the water–gas shift reaction promoted by Pt based catalysts, **X.Lian** (连欣) ,W.L. Guo, J. Shu, X. Zhang, Z. Liu, Y. Zhang, R. Liu*, *Theoretical Chemistry Accounts*, 2015, 134, 19 SCI 收录, IF=1.6.
13. DFT study of Pt_{7-x}Ru_x (x = 0, 1, 2, 3) clusters and their interactions with CO, **X. Lian** (连欣) , W.Q. Tian, W.L. Guo, F. Liu, P. Xiao, Y. Zhang, *The European Physical Journal D* , 2014, 68, 72, SCI 收录, IF=1.3.