

	李有勇 Youyong Li
	教授
	苏州大学，中国
研究领域	材料模拟，计算化学
<p>李有勇，男，1975年1月生，苏州大学特聘教授。      1997年获得北京大学化学系学士学位。      2000年获得北京大学化学系硕士学位。      2004年12月获得美国加州理工学院(California Institute of Technology)化学博士学位。      2005年至2006年，在加州理工学院从事博士后研究。      2006年至2009年，在美国加州理工学院材料模拟中心(Materials Simulation Center)担任生物科技和功能材料项目主任(Director)。      2009年4月进入苏州大学功能纳米与软物质研究院，受聘特聘教授，博士生导师，从事材料模拟、计算化学的研究工作。</p> <p>研究领域：材料模拟，计算化学。</p> <p>以创新的理论方法为核心，发展了材料结构模拟方法、提高了预测效率并取得了多项创新性的应用成果，针对材料原子数多，发展了多尺度粗粒化方法和器件模拟方法，对能源材料结构进行了优化，设计了多种新型能源纳米材料（催化材料、光伏材料等）。发表SCI学术论文300余篇，其中IF&gt;10论文60余篇，包括Nat. Commun. 5篇，J. Am. Chem. Soc. 10篇，Angew. Chem. Int. Ed. 5篇等，论文他引10000余次，H-index54。主持和曾主持5项基金委NSFC项目，主持和参与科技部重点研发计划课题2项，主持Jun口重点课题3项，主持省部级项目多项。</p> <p>担任Sci. Reports编委，Frontiers in Materials编委，担任中国化学会计算化学委员会委员，担任中国材料研究学会材料基因组分会委员，担任江苏省化学化工学会理论化学委员会副主任委员，获得2017年度江苏省科学技术奖一等奖，入选江苏省333高层次人才和苏州紧缺人才。</p> <p>个人网站：<a href="http://modeling.org.cn">http://modeling.org.cn</a></p>	
近期代表作：	
(1) Lu Wang*, Hai Xiao, Tao Cheng, Youyong Li*, William A. Goddard III*, "Pb-activated Amine-assisted Photocatalytic Hydrogen Evolution Re-action on Organic-Inorganic Perovskites", <i>J. Am. Chem. Soc.</i> , 2018, 140, 1994-1997. (2) Junqing Yan, Lingqiao Kong, Yujin Ji, Jai White, Youyong Li*, Jing Zhang, Pengfei An, Shengzhong Liu*, Shuit-Tong Lee, Tianyi Ma*, "Single atom tungsten doped ultrathin $\alpha$ -Ni(OH) <sub>2</sub> for enhanced electrocatalytic water oxidation", <i>Nature Communications</i> , 2019, 10:2149. (3) Yonggang Feng, Qi Shao, Yujin Ji, Xiaoneng Cui, Youyong Li*, Xing Zhu, and Xiaoqing Huang*, "Surface-modulated palladium-nickel icosahedra as high-performance non-platinum oxygen reduction electrocatalysts," <i>Science Advances</i> 4 (7) (2018). (4) Yunxia Liu, Krisztian Palotas, Xiao Yuan, Tingjun Hou, Haiping Lin*, Youyong Li*, and Shuit-Tong Lee, "Atomistic Origins of Surface Defects in CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbBr <sub>3</sub> Perovskite and Their Electronic Structures," <i>Acs Nano</i> 11 (2), 2060-2065 (2017). (5) Lili Zhu, Haiping Lin, Youyong Li*, Fan Liao, Yeshayahu Lifshitz, Minqi Sheng, Shuit-Tong Lee, and	

Mingwang Shao\*, "A rhodium/silicon co-electrocatalyst design concept to surpass plati-num hydrogen evolution activity at high overpotentials," *Nature Communications* 7 (2016).