

山东师范大学物理与电子科学学院

教师风采

刘新国的个人介绍

基本资料	
姓名:	刘新国
出生日期:	1972-02-28
性别:	男
籍贯:	山东省
职称:	教授, 硕士生导师
通信地址:	山东师范大学物理与电子科学学院, 济南, 山东, 250014
电话:	0531-86180349 (o)
E-Mail:	liuxinguo@sdsu.edu.cn

请上传相片

个人简介 / 教育经历	
2001.9-2004.6 山东师范大学物理与电子科学学院, 理学博士	
1995.9-1998.7 山东师范大学物理系, 理学硕士	
1991.9-1995.7 山东师范大学物理系, 理学学士	

科研经历:
1、用含时波包方法研究多原子分子的碰撞反应动力学
2、用量化计算方法研究多原子分子的碰撞反应势能面的构造
3、用分子力学量子力学方法研究生物大分子动力学
4、用含时波包方法研究分子与固体表面的碰撞散射

承担科研项目:
1、国家自然科学基金项目: 10504017 多原子分子碰撞反应势能面的构造及其量子动力学研究(2006.1-2008.12)
2、山东省自然科学基金项目: Q2006A06 分子碰撞全维势能面的构造及其量子动力学研究, (2007.1-2008.12)
3、山东省中青年科学家科研奖励基金(博士基金), 几种病毒蛋白和候选药物作用机制的分子动力学模拟及量子力学分析, (2009.01- 2011.12)
4、国家自然科学基金项目: 10874104 蛋白质与其抑制剂作用机制的分子动力学模拟和量子力学分析(2009.1-2011.12)
5、国家自然科学基金项目: 10474060 基于量子理论的大分子过程的理论与计算研究(2005.1-2007.12)
6、教育部科学技术研究重点项目: 206093 分子碰撞全维势能面的构造及其量子动力学研究(2006.1-2008.12)
7、高等学校博士学科点专项科研基金: 20093704110001 病毒蛋白和候选药物作用机制的分子动力学模拟及量子力学分析(2010.1-2012.12)
8、山东省自然科学基金重点项目: Z2007A05 生物分子的分子动力学模拟及量子力学分析(2007.12- 2010.12)
9、山东省自然科学基金项目: Y2003A02 多原子分子及大分子碰撞的理论与计算研究(2004.1-2006.12)
10、山东师范大学博士基金项目: 多原子分子碰撞反应的理论与计算研究(2005.1-2007.12)

▶ 获得奖励情况和荣誉称号:

1. 课题《多原子分子碰撞的理论与计算研究》获山东省2004年高等学校优秀科研成果二等奖(第一完成人)。
2. 课题《多原子分子及生物大分子动力学理论研究》获山东省2010年高等学校优秀科研成果二等奖(第一完成人)。
3. 获首届山东省研究生教育省级教学成果二等奖(第二完成人)。
4. 获首届山东师范大学研究生教育成果一等奖(第二完成人)。
5. 获2009年度研究生优秀教学奖。
6. 获山东师大第九届杰出青年荣誉称号。

▶ 科研工作情况:

自2001年9月至今,在山东师范大学物理与电子科学学院原子与分子物理省级重点学科从事科学研究与教学工作。主要从事原子分子碰撞及分子反应动力学理论与计算、多原子分子反应势能面的构造、生物体系的计算与模拟方面的研究。已主持完成1项国家自然科学基金项目(已结题)、1项山东省自然科学基金项目(已结题),作为主要研究人员参加过3项国家自然科学基金项目、2项国家自然科学基金国际合作项目、1项教育部科学技术研究重点项目、3项山东省自然科学基金项目,目前主持1项山东省优秀中青年科学家科研奖励基金项目(博士基金)。已分别在《Chemical Physics Letter》《Chemical Physics》、《Molecule Physics》《International Journal of Quantum Chemical》《Journal of Molecular Structure - Theochem》《Journal of molecular modelling》《Chinese Physics(B)》、《Science in China(G)》、《Chinese Physics Letter》、《中国科学》、《物理学报》、《物理化学学报》《原子与分子物理学报》等国内外核心学术期刊发表研究论文45篇,其中26篇被SCI收录。获山东省高等学校优秀科研成果二等奖2项(第一完成人)。读博期间获得过山东师范大学优秀博士学位论文和山东师范大学第六届(博士)研究生优秀科研成果二等奖。先后主讲过硕士博士研究生、本科生的《高等量子力学》《量子分子动力学》《原子结构与原子光谱》《原子与分子物理前沿专题》《电动力学》《固体物理》《热力学•统计物理》《电磁场理论》《普通物理学》《热学教程》等主干必修课程和指导本科毕业论文。作为硕士生导师,已有3名硕士生顺利毕业,09年毕业的研究生许文武同学在校期间发表第一作者SCI论文5篇,并获得山东师范大学优秀硕士学位论文及山东师范大学硕士研究生优秀科研成果一等奖,考取了中科院大连化物所的博士研究生,目前指导5名硕士研究生。

▶ 出版作品:

▶ 发表的主要论文:

1. 刘新国、白丽华、张庆刚,“多原子分子在金属表面解离吸附的量子动力学研究”,原子核物理评论,Vol.19,增刊,2002.
2. 白丽华、刘新国、张庆刚,“D+CH₄→CH₃+HD反应的量子含时动力学研究”,山东师范大学学报,Vol.18, No.1, 2003.
3. 白丽华、刘新国、张庆刚,“D+CD₄→CD₃+D₂反应的量子含时动力学研究”,原子与分子物理学报, Vol.20, No.1, P21-24, 2003.
4. 白丽华、刘新国、张庆刚,“CH₄和CD₄解离吸附的量子含时动力学研究”,原子与分子物理学报, Vol.20, No.2, P207-210, 2003
5. 白丽华、张庆刚、刘新国,“D+CD₄→CD₃+D₂反应的四维量子散射计算”,物理学报, Vol.52, No.11, P2774-2780, 2003.
6. 刘新国、白丽华、张庆刚,“O(3P)+CH₄→CH₃+OH反应的半刚性振转靶计算”,中国科学(G), Vol.33, No.6, P532-537, 2003.
7. Liu Xinguo, Bai Lihua, Zhang Qinggang, “Semirigid vibrating rotor target calculation for reaction O(3P)+CH₄→CH₃+OH”, Science in China(G), Vol.47, No.2, 2004.
8. 刘新国、张庆刚,“D+CH₄反应的SVRT含时波包理论研究”,物理化学学报, Vol.20, No.5, 2004.
9. Liu Xinguo, Zhang Qinggang, Zhang Yici, Wang Mingliang, Zhang Zenghui, “Time-Dependent Quantum Dynamics study for Reaction of D+CH₄ CH₃+HD”, Chinese Physics, Vol.13, No.7, 2004.
10. 刘新国、李皓、张庆刚,“原子-多原子分子反应的含时波包理论研究”,原子与分子物理学报, Vol.21, 增刊 2004.
11. 刘新国、张庆刚,“O(3P)+CD₄反应的含时波包动力学计算”,原子与分子物理学报, Vol.21, No.3, 2004.

12. 李皓、刘新国、张庆刚, 分子振动对 $\text{H}+\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2+\text{H}_2$ 反应的影响, 山东师范大学学报, Vol.19, No.4, 2004.
13. Li Hao, Liu Xinguo, Zhang Qinggang, Stereodynamics and rovibrational effect for $\text{H}+\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2+\text{H}_2$ reaction, Chinese Physics Letter, Vol.22, No.5, 2005.
14. Qingtian Meng, Xinguo Liu, Qinggang Zhang, Keli Han, "Time-dependent wavepacket approach to the influence of intense fields on the population of molecular excited states", Chemical Physics, Vol.315, 2005.
15. 张少龙, 时术华, 伊长虹, 刘新国, 张恽慈, "共轭帽分子分割法研究蛋白质的电荷密度", 山东师范大学学报, Vol.21, No.1, 2006.
16. 段莉莉, 全艳, 孟凡胜, 刘新国, 时术华, 张庆刚, 分子碎片共轭帽基团法研究蛋白质相互作用能, 山东师范大学学报, Vol.22, No.2, 2007.
17. 徐博, 刘新国, 孟凡胜, 段莉莉, 张少龙, 张庆刚, 甲烷燃烧反应的含时量子动力学研究, 济南大学学报, Vol.21, No.4, 2007.
18. 扈国栋, 张少龙, 张庆刚, 刘新国, 刘宝山, 孙善书, FKBP12与其抑制剂作用的结合自由能计算, 山东师范大学学报, Vol.23, No.2, 2008.
19. 孙善书, 刘新国, 张庆刚, 半刚性振转靶模型在 $\text{Cl} + \text{CH}_4$ 反应中的应用, 山东师范大学学报, Vol.23, No.3, 2008.
20. 许文武, 刘新国, 栾世霞, 张庆刚, 张培玉, An ab initio potential energy surface of the $\text{He}+\text{H}_2^+ \rightarrow \text{HeH}^++\text{H}$ reaction, Chemical Physics Letter, Vol.464, No.1-3, 2008.
21. 许文武, 刘新国, 张庆刚, Theoretical study of the stereodynamics of the $\text{He} + \text{H}_2+\text{HeH}^+ + \text{H}$ reaction, Molecular Physics, Vol.106, No.14, 2008.
22. Xu Wen-Wu(许文武), Liu Xin-Guo(刘新国), Luan Shi-Xia(栾世霞), Sun Shan-Shu(孙善书), Zhang Qing-Gang(张庆刚), Theoretical study of the stereodynamics of the $\text{He} + \text{HD}^+$ reaction, Chinese Physics B, Vol.18, No.1, 339, 2009.
23. 孙善书, 刘新国, 徐博, 许文武, 扈国栋, 张庆刚, $\text{Cl}+\text{CH}_4$ 反应的含时量子动力学研究, 原子与分子物理学报, Vol.26, No.1, 2009.
24. Wen Wu Xu, Xin Guo Liu, Shi Xia Luan, Qing Gang Zhang, Theoretical study of the stereodynamics of the reactions of $\text{He}+\text{H}_2^+/\text{HD}^+$, Chemical Physics, Vol.355, No.1, 21, 2009.
25. Wen Wu Xu, Xin Guo Liu, Shi Xia Luan, Qing Gang Zhang, Quasi-classical trajectory study on $\text{He}+\text{H}_2^+/\text{D}_2^+/\text{T}_2^+$ reactions, International Journal of Quantum Chemistry, Vol.110, No.4, 2009.
26. 孔浩, 刘新国, 许文武, 梁景娟, 张庆刚, $\text{He}+\text{H}_2^+$ 及其同位素取代反应的立体动力学研究, 物理学报, Vol.58, No.10, 2009.
27. 孔浩, 刘新国, 许文武, 张庆刚, 反应物分子振动量子数对反应 $\text{He}+\text{H}_2^+ \rightarrow \text{HeH}^++\text{H}$ 影响的准经典轨线研究, 物理化学学报, Vol.25, No.5, 935, 2009.
28. KONG Hao (孔浩), LIU Xin-Guo(刘新国), XU Wen-WU(许文武), ZHANG Qing-Gang (张庆刚), Study of Stereodynamics for the $\text{He} + \text{D}_2^+ \rightarrow \text{HeD}^++\text{D}$ Reaction on PALMIERI Surface, Chinese Physics Letter, Vol.26, No.5, 053102_1, 2009.
29. Xinguo Liu, Hao Kong, Wenwu Xu, Jingjuan Liang, Fujian Zong, Qinggang Zhang, Vector correlation in the $\text{He}+\text{H}_2^+ \rightarrow \text{HeH}^++\text{H}$ reaction: a quasi-classical trajectory study on two potential energy surfaces, Journal of Molecular Structure:THEOCHEM, Vol.908, No.1-3, 2009.
30. 扈国栋, 刘新国, 张少龙, 张庆刚, 原子分子物理学报, Vol.27, No.2, 2009.
31. 梁景娟, 刘新国, 许文武, 孔浩, 张庆刚, $\text{He}+\text{H}_2^+ \rightarrow \text{HeH}^++\text{H}$ 反应的从头算势能面, 原子分子物理学报, Vol.27, No.2, 2009.
32. 梁景娟, 刘新国, 许文武, 孔浩, 张庆刚, Isotope effect on stereodynamics of the reactions of $\text{H}+\text{HeH}^+/\text{H}+\text{HeD}^+/\text{H}+\text{HeT}^+$, Journal of Molecular Structure:THEOCHEM, Vol.942, No.1-3, 93-97, 2010.
33. Chen, Jianzhong; Zhang, Shaolong; Liu, Xinguo; Zhang, Qinggang, Insights into Drug Resistance of Mutations D30N and I50V to HIV-1 Protease Inhibitor TMC-114: Free Energy Calculation and Molecular Dynamic Simulation, Journal of molecular modeling, Vol.16, No.3, 459-468, 2010.
34. 朱通, 陈建中, 扈国栋, 刘新国, 张庆刚, Theoretical study of the stereodynamics for the reaction $\text{O}(3\text{P}) + \text{HCl}$, Chinese Physics B, Vol.19, No.8, 083402-1-6, 2010.
35. 刘新国, 许文武, 张庆刚, $\text{H}+\text{H}_2$ 体系的从头算势能面及准经典轨线研究, 中国科学(物理学), Vol.40, No.7, 886-890, 2010.
36. 刘新国, 孙海竹, 刘会荣, 张庆刚, $\text{O}+\text{H}_2$ 及其同位素取代反应的立体动力学研究, 物理学报, Vol.59, No.11, 7796-7802, 2010.
37. 扈国栋, 王敦友, 刘新国, 张庆刚, A computational analysis of the binding model of MDM2 with inhibitors, Journal computer-aided molecular design, Vol.24, No.8, 687-697, 2010.
38. 刘会荣, 刘新国, 孙海竹, 张庆刚, Quasi-Classical Trajectory Study on Reactions, Chinese Physics

Letter. Vol. 27, No. 10, 103101-1-4, 2010.

39. 孙海竹, 刘新国, 吕娟娟, 刘会荣, Quasi-Classical Trajectory Study at different collision energy on $O^+ + DH(v=0, j=0) \rightarrow OD^+ + H$ Reaction, Chinese Journal of Chemical Physics. Vol. 23, No. 5, 521-526, 2010.
40. 吕娟娟, 刘新国, 梁景娟, 孙海竹, Collision energy influence on the stereo-dynamics of the $H + HeH^+(v=0, j=0) \rightarrow H_2^+ + He$ reaction, Canadian Journal of Physics, Vol. 88, No. 12, 899-904, 2010.
41. 吕娟娟, 刘新国, 赵联庆, 反应物转动激发对反应 $H + HeH^+ \rightarrow H_2^+ + He$ 立体动力学性质的影响, 山东科学. Vol. 23, No. 6, 26-30, 2010.
42. 刘会荣, 刘新国, 朱通, 孙海竹, 张庆刚, The effect of vibrational excitation of the reaction $O(3P) + HCl$ OH+Cl for the electronic states, Journal of Theoretical and Computational Chemistry, Vol. 9, No. 6, 1043-1052, 2010.
43. 赵联庆, 刘新国, 张庆刚, 碰撞能对基元反应 $He + H_2^+(v=3, j=1)$ 动力学性质的影响, 山东科学. Vol. 24, No. 1, 45-50, 2011.
44. 孙海竹, 刘新国, 刘会荣, 反应物振动激发对反应 $O^+ + DH(v=0, 1, 2, 3, j=0) \rightarrow OD^+ + H$ 影响的准经典轨线研究, 化学学报, Vol. , No. , 2011.
45. 刘新国, 刘会荣, 张庆刚, An ab initio potential energy surface and dynamics of the $Ar + H_2^+$ reaction, Chemical Physics Letter. Vol. , No. , 2011.

▶ 批准与申请的专利:

[关闭窗口]