

大连化物所因公出访事后公示表

出访人团组成员基本信息:		
姓名	部门	职务
韩克利	1101 组	研究员
实际执行情况: 2014 年 2 月 15 日 大连-台北 2014 年 2 月 15-2014 年 2 月 20 日 参加第六届两岸化学动力学研讨会 2014 年 2 月 20 日 台北-大连		
经费开支情况: 往返国际机票: 4768 元; 住宿费: 注册费:		
出访总结: <p>“2014 年第六届两岸动力学研讨会”(The 6th Cross Strait Workshop on Chemical Dynamics and Kinetics)于 2014 年 2 月 15 日至 20 日在台湾大学化学系举办。该会议是计算化学领域最重要的国际学术会议之一,大会主旨是给世界理论及计算化学华人专家提供互相交流及分享发展的平台,以促进世界华人在动力学领域的贡献。</p> <p>我所韩克利研究员此次应邀参会,并做题为“激发态氢键动力学”的邀请报告。韩克利研究员向与会者介绍了近期研究组在电子激发态氢键结构和动力学、激发态氢键加强促进超快内转换过程、激发态氢键与电子光谱移动规则、激发态氢键诱导的中间态以及电荷转移激发态等研究方面取得的最新进展,并讨论了该研究领域未来的发展方向。我们首次提出了电子激发态氢键在大约两百飞秒的时间范围内快速加强的机制,从而推翻了过去人们普遍认可的激发态氢键解离机</p>		

理；最早给出了激发态氢键动力学的电子光谱移动判据，证实了分子间氢键导致的电子光谱的红移或蓝移与激发态氢键的加强或减弱之间的对应关系；提出了一个新的荧光猝灭机理，阐明了激发态氢键动力学对发生在电子激发态的内转换、系间窜越、电荷转移、质子迁移等重要光物理过程的调控机制等。这些研究成果使人们对激发态氢键在光诱导的电子转移、能量传递、信号传导以及化学转换等方面所起的关键作用有了深入清晰的认识。

此次会议，不但扩大了我们研究小组在国际上的影响，而且还有利于加强我所与国际同行在计算化学领域国际前沿课题的合作。