

## 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: 2015 年 1 月 13 日大连-北京-纽瓦克-奥兰多 2015 年 1 月 14 日-17 日参加 2015 年能源、材料、纳米技术、太阳能光伏学术研讨会 2015 年 1 月 18 日-19 日奥兰多-纽瓦克-北京-大连		
经费开支情况: 往返国际机票: 12471 元; 住宿费: 950.63 美元 注册费: 868 美元		
出访总结: <p>“2015 年能源、材料、纳米技术、太阳能光伏学术研讨会”于 2015 年 1 月 12 日至 15 日在美国奥兰多佛罗里达大学举行。该会议是能源、材料、纳米技术等领域最重要的学术会议之一, 它起始于 2008 年, 每年举办一次, 吸引了能源、材料、纳米技术领域的著名学者一起就该领域的前沿课题展开讨论。</p> <p>我所韩克利研究员此次应邀参会, 并做题为“Anisotropic Mobilities in Organic Semiconductors”(有机半导体迁移率的各向异性研究进展)的邀请报告。韩克利研究员向与会者介绍了, 其研究小组采用密度泛函理论对有机半导体材料的载流子输运性质以及有机分子在溶液中激发态质子转移机理进行了研究。研究表明: 在并五苯分子上附着具有吸电子能力的取代基团的衍生物体系, 发现通过化学修饰, 提高了衍生物分子的电子注入能力和材料的稳定性, 增强了电子</p>		

输运能力，为新型功能材料的设计提供了理论参考；对茈萘亚胺衍生物体系进行了理论计算，证明了分子构象，分子间堆栈方式和载流子输运之间存在密切的联系。理论模拟表明，茈萘亚胺材料在太阳光谱范围有很强的吸收，引入吸电子基团有利于电子输运过程，获得的衍生物材料可以具有较高的电子迁移率。

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。