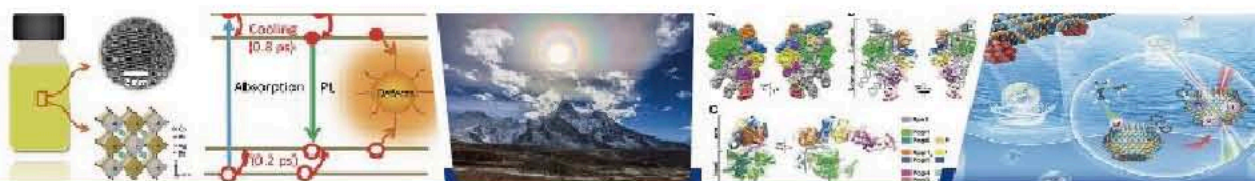




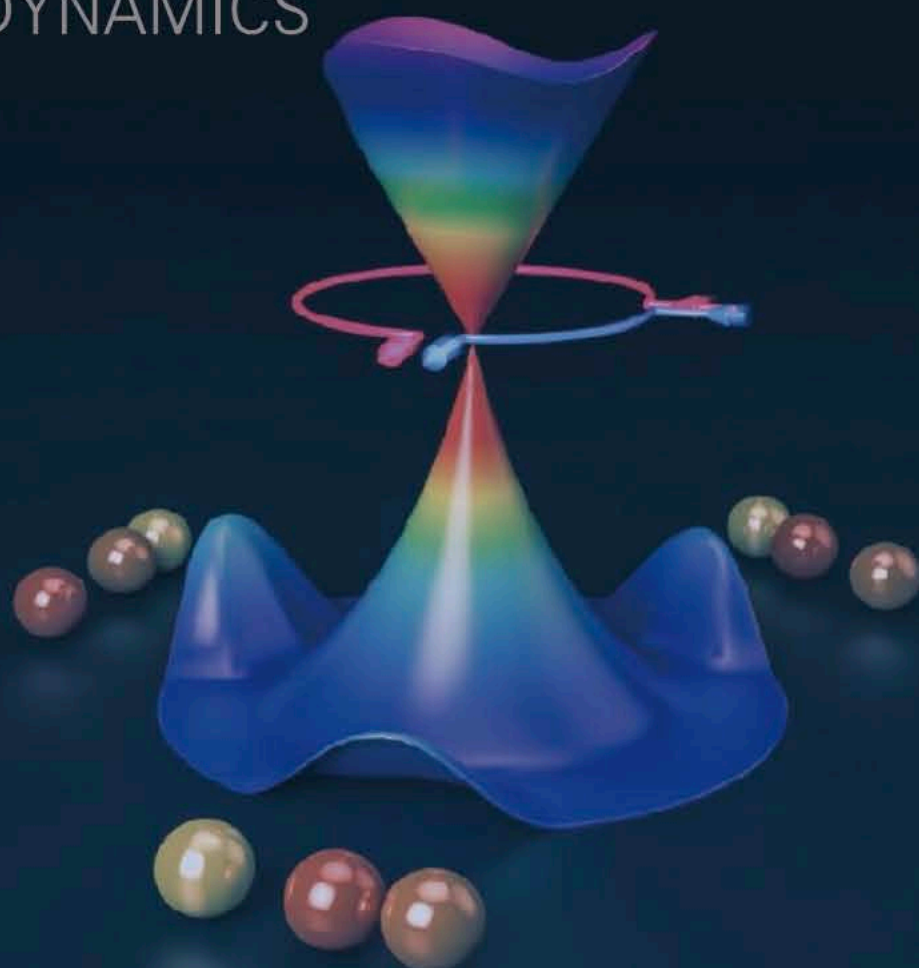
分子反应动力学 国家重点实验室 年度报告

2018



ANNUAL REPORT

OF THE STATE KEY LABORATORY OF MOLECULAR
REACTION DYNAMICS



一、研究水平与贡献

本年度我室共承担各类科研项目 118 项，实到经费 8634 万元，国家重点实验室专项资金的科研经费为 1619 万元，总经费为 10252.54 万元。其中科技部和基金委项目 60 项，经费 3550 万元。中科院经费 2308 万元，其他省部级经费 337 万元，大连市经费 695 万，大连化物所经费 1668 万元。承担的项目包括科技部国家重点研发计划，基金委的科学中心、重大仪器专项、重大、重点、杰青、优青、面上以及青年项目，中科院的先导专项 A、先导专项 B、大科学计划培育、人才、洁净能源创新研究院项目，中组部万人计划和青年千人等各类人才项目，新增大连市科技创新基金、科技之星和人才创新创业项目，以及大连化物所的大连光源基金、自主部署基金等。所有研究项目都按计划进行或结题。我室安排自主课题 6 项，合计总额为 274 万元。

2018 年我室研究人员共发表 SCI 文章 137 篇，其中化学学科 1 区文章共 39 篇，占总论文数的 28.5%。

1. 承担任务

列举不超过 5 项当年新增的重要科研任务。

序号	课题名称	项目(课题)编号	负责人及单位	起止时间	总经费(万元)	本年度经费(万元)	经费来源	类别	类型	研究方向
1	万人计划-科技创新领军人才	无	张东辉, 大连化物所	2018.1-2020.12	90	40	中组部	主要负责	万人计划	化学反应动力学
2	多原子分子反应动力学	21722307	傅碧娜, 大连化物所	2018.1-2020.12	130	84.6	基金委	主要负责	优青	化学反应动力学
3	万人计划-科技创新领军人才	无	张东辉, 大连化物所	2018.1-2020.12	90	40	中组部	主要负责	万人计划	材料的动力学模拟与设计研究
4	超快光谱与动力学	21725305	金盛焯, 大连化物所	2018.1-2022.12	350	185	基金委	主要负责	杰青	超快时间分辨光谱与动力学
5	纳米结构跨频域及跨时域尺度的动力学表征	2018YFA0208700	金盛焯, 大连化物所	2018.5-2023.4	580	348	科技部	主要负责	重点研发计划	超快时间分辨光谱与动力学

2. 研究工作水平

(1) 代表性研究工作

(1.1) 复杂分子体系反应动力学研究

代表性研究成果1：非铅双钙钛矿纳米晶研究取得新进展

我所韩克利研究员团队在非铅双钙钛矿纳米晶研究中取得新进展。该团队首次合成出具有立方相的非铅双钙钛矿 $\text{Cs}_2\text{AgBiX}_6$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 纳米晶, 并发现其热载流子具有超快的冷却时间 (小于 1ps, $1\text{ps}=10^{-12}\text{s}$), 表明该材料是一种很好的发光材料。相关研究成果作为热点文章发表在《德国应用化学》(Angew. Chem. Int. Ed.) 上。含铅钙钛矿纳米晶 CsPbX_3 ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 具有吸光系数大, 发光量子产率高, 带隙易调节等优点, 因此被广泛研究于发光二极管(LED)、纳米激光器、太阳能电池以及光电探测器等方向。然而其中含有的重金属元素铅对环境 and 人类造成危害, 限制了其商业化应用。寻找无毒且性能好的非铅钙钛矿成为当下的研究热点和难点。科研人员尝试采用毒性较低的铋(Bi)元素来取代铅, 形成低维钙钛矿结构。该团队曾于2017年首次成功合成出含Bi的非铅钙钛矿纳米晶 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ (Angew. Chem. Int. Ed.), 并揭示了其发光动力学机理。在此基础上, 团队成员采用溶液法进一步合成了 $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ 双钙钛矿纳米晶, 引入的 Ag^+ 离子可以和 Bi^{3+} 离子形成三维立方相钙钛矿。同时, 通过采用不同的卤元素(Cl, Br, I), 可以实现该纳米晶在 395-575nm 范围内调节其发光光谱。科研人员通过热载流子动力学研究发现, 该材料具有超快的热载流子冷却时间 (小于 1ps), 该性能与含铅钙钛矿纳米晶热载流子动力学行为相似, 这表明该非铅钙钛矿纳米晶很有可能取代目前的含铅钙钛矿纳米晶, 有非常广阔的应用前景。此外, 该研究还提出了通过减少表面缺陷来提高材料性能的新方案。

(1.2) 化学反应动力学

代表性研究成果2：中国科学家首次观测到化学反应中的“日冕环”现象

由我所和中国科学技术大学合作, 首次利用自主发展的目前最高分辨率的交叉分子束离子成像技术, 观测到了化学反应散射中日冕环的现象, 并结合量子分子反应动力学理论分析, 首次揭示了该现象所隐藏的反应动力学机理。该研究成果发表在《自然化学》(Nature Chemistry) 上。该团队自主研制了一台独特的结合阈值激光电离技术以及速度成像技术的交叉分子束反应动力学研究装置, 使

得实验上获得的 H 原子产物的速度分辨率达到了世界上同类仪器的最好水平。利用这一装置，研究小组开展了对化学中最经典的 $H+HD \rightarrow H_2+D$ 反应的实验动力学研究。他们首次测得了这一反应产物全量子态分辨的产物速度影像，并且在实验上首次观测到了反应前向散射产物中存在的角分布振荡现象。孙志刚和张东辉等人通过精确量子动力学分析，发现这一角分布振荡现象其实是由散射过程中的少数几个分波散射的角分布结构引起的。通过对这些振荡结构的测量和分析，我们可以了解到引起前向散射的反应过渡态和中间体的大小，也可以知道这些前向振荡结构是具体来自哪几个散射分波。通过他们的研究发现，这些在化学反应中首次发现的前向散射振荡结构在三维散射图像中与大气光学中观测到的日冕环的散射图像非常相似：通过观测光与水滴的日冕环散射，我们可以了解自然界中的水滴的大小；而通过观测化学发应中的前向角分布振荡结构，我们可以清晰地研究化学反应的过渡态结构以及动力学。

代表性研究成果3：首次观测到化学反应中的“几何相位”效应

我所与中国科学技术大学的联合研究团队，利用自主发展的具有国际上最高分辨率的交叉分子束离子成像装置，结合高精度量子分子反应动力学理论分析，对 $H+HD$ 反应中的“几何相位”效应展开深入研究并取得重大突破。在实验上，王兴安和杨学明等自主研制了一台独特的结合阈值激光电离技术，以及离子速度成像技术的交叉分子束反应动力学研究装置，使得实验上获得的氢原子产物的散射角度分辨率达到了世界上同类仪器的最高水平。利用这一装置，研究小组成功地测得了 $H+HD \rightarrow H_2+D$ 反应的全量子态分辨产物速度影像，在实验上观测到了转动态分辨的 H_2 产物前向角分布快速振荡结构。在理论计算上，孙志刚等发展了独特的描述化学反应中“几何相位”的动力学理论，并基于张东辉等发展的高精度的势能面，通过精确量子动力学分析发现，只有引入“几何相位”效应的理论计算才能正确地描述实验观测到的前向散射振荡结构。该进展是科学实验与理论计算的又一次“完美结合”，用交叉分子束和量子化学方法首次定量了化学反应中的“几何相位”作用，把化学动力学中的一个“不可能”变成了“可能”。该项研究揭示了“几何相位”在化学反应中独特的作用以及“几何相位”效应的物理本质，对于研究广泛存在锥型交叉的量子体系具有重要意义。同时，通过这项研究，科学家们还在实验上发现和证实了这一重要反应体系在高速反应时一个全

新的反应机理,这对于从根本上理解这一重要体系的高能反应动力学具有重要意义。

(1.3) 分子模拟与设计研究

代表性研究成果4：生物分子模拟应用研究取得新进展

我室李国辉研究员团队(1106组)与中科院上海生物化学与细胞生物学研究所杨巍维研究员团队合作,通过分子动力学模拟的手段,解释了胶质瘤细胞中关键氨基酸的磷酸化过程对肿瘤细胞生长的影响,相关结果以共同通讯作者的形式发表于《分子细胞》(Molecular Cell)杂志。杨巍维团队发现了磷酸甘油酸激酶(PGK1)的氨基酸T243磷酸化后可改变PGK1和底物的亲和力,从而促进PGK1糖酵解方向的活性,以及促进胶质瘤细胞的有氧糖酵解、细胞增殖和肿瘤生长。但是,仅依据实验无法在分子层面上,详细阐明T243磷酸化过程是如何影响PGK1与底物结合的分子机制。为了回答这一关键科学问题,李国辉团队与杨巍维团队密切合作,运用分子动力学模拟的方法,针对T243磷酸化前后PGK1与底物结合的分子机制进行研究,并发现T243的磷酸化影响了另一关键氨基酸(K216)的侧链朝向,进而对PGK1和底物结合的关键相互作用产生影响,导致磷酸化前后底物与PGK1亲和力发生明显变化。这一发现,从分子层面对实验结果进行了验证,并为胶质瘤治疗的新策略提供了详细的理论依据。

代表性研究成果5 揭示真核生物 tRNA 加工成熟分子机制研究方面取得重大进展

我室李国辉研究员团队与上海交通大学精准医学研究院雷鸣教授团队,以长文的形式在国际学术期刊《科学》(Science)在线发表了两个课题组作为共同通讯作者单位合作完成的最新研究成果——“Structural insight into precursor tRNA processing by yeast ribonuclease P”。Ribonuclease (RNase) P 是一类古老的核酸内切酶,它广泛的存在于所有生命体中。RNaseP 通过切割 pre-tRNA5' 端序列促使 tRNA 成熟,该过程在蛋白质合成及维系细胞功能占据十分重要的地位。真核 RNaseP 是由一个单链 RNA 分子和十几个蛋白复合体组成的重要生物分子机器。在本研究中,雷鸣团队成功解析了酵母内源 RNaseP 全酶及其与底物 pre-tRNA 的复合物结构,该结构揭示了真核生物中 RNaseP 各亚基在空间上原子分辨率的组织形式。李国辉团队通过分子动力学模拟揭示了不同组成蛋白对于核酶自身不同部位的稳定性具有不同的作用;并结合 QM/MM/MD 模拟及自由能计算分析了 RNaseP 催化反应机理,提出了水分子介导的的双镁离子催化的

SN2 反应模型，深入阐明了这一类古老核酶的催化微观机理。该研究工作不仅清楚地理解了真核生物 RNaseP 催化底物 tRNA 前体切割成熟的分子机制，也为了解以 RNA 为基础的核糖核蛋白复合体的催化共性、底物 tRNA 的分子识别机理及 RNA 核酶的生物进化过程提供了新的认知。

(1.4) 光电材料动力学

代表性研究成果6：电荷掺杂量子点动力学研究取得系列新进展

吴凯丰研究员团队采用电荷掺杂纳米晶量子点构建模型体系，结合飞秒瞬态吸收光谱动力学测试，揭示了纳米晶在多电子光催化和光电转换应用中的一系列重要动力学过程。相关工作分别发表于《美国化学会志》(Journal of the American Chemical Society)、《化学科学》(Chemical Science)和《物理化学快报》(The Journal of Physical Chemistry Letters)。从太阳能到燃料的转换过程(如水分解、CO₂还原、固氮等)涉及的通常都是多电子光催化反应。在这些反应中，捕光材料需要连续吸收多个太阳光子，并且每个光子被吸收后都能驱动从捕光材料到催化剂的有效电荷分离。受研究体系和研究手段的限制，以往文献中报道的超快光谱研究通常只关注吸收一个光子后的单步电荷分离。这些工作报道的电荷分离效率通常都很高(甚至接近100%)，然而整个多电子光催化反应的效率通常只有10%的量级，两者之间存在巨大的差异。吴凯丰研究团队提出，在多电子光催化反应中，由于电子与空穴转移速率的欠匹配以及催化剂翻转速率较慢，吸光材料和催化剂上都会存在积累电荷，这些积累电荷将大大降低后续的电荷分离效率。为此，该研究团队采用电荷预掺杂的纳米晶量子点构建模型体系，分别研究了捕光材料和催化剂上的积累电荷对电荷分离速率和效率的影响，揭示了积累电荷产生的库伦势垒减慢电荷转移速率、电荷复合途径的增加缩短电荷分离态的寿命以及积累电荷带来的额外复合渠道(如俄歇复合等)降低电荷分离效率等基本物理化学现象。相关工作以“连载”标题形式发表于《美国化学会志》：“Charge Transfer from n-Doped Nanocrystals: Mimicking Intermediate Events in Multielectron Photocatalysis”和“Electron Transfer into Electron-Accumulated Nanocrystals: Mimicking Intermediate Events in Multielectron Photocatalysis II”。

除了用于模拟多电子光催化反应的中间步骤，电荷掺杂还可用于鉴别一些复杂的异质结纳米晶的能级排布和测量其中的载流子复合动力学。半导体异质结纳

米晶可展现出单一组分纳米晶所不具备的光电性质，因此是一类重要的光电材料。决定这些性质最为关键的一个因素就是异质结中不同组分间的能级排布：I型能级排布可在空间上限域电子和空穴，适合做发光材料；II型或者准II型能级排布则可在空间上实现电子和空穴的分离，适合于太阳能转换等应用。然而，由于尺寸、形貌、界面应力等诸多因素的影响，异质结纳米晶中的能级排布通常很难测定。该研究团队提出，以掺入的电荷作为“探针”，观测电荷占据各组分跃迁的情况，可以快速测定组分间的能级排布。以CdSe量子点@CdS纳米棒这一复杂核壳结构为例，系统研究了点和棒的尺寸对能级排布的影响。此外，掺入的电荷还可以帮助测试带电激子态的俄歇复合等重要的动力学过程。此工作以“Carrier-doping as a tool to probe the electronic structure and multi-carrier recombination dynamics in heterostructured colloidal nanocrystals”为题发表于《化学科学》。

考虑到电荷掺杂对研究纳米晶光谱和动力学性质的重要性，该研究团队还发展了一种针对欠稳定材料的“无损”动态掺杂方法。以铅卤素类钙钛矿纳米晶为例，此类材料展现出优异的发光和光电转换性质；然而受限于其化学稳定性，目前尚无在带边成功掺入电荷的报道。该研究团队提出，采用三脉冲泵浦-泵浦-探测技术测量纳米晶-电荷受体杂化材料的瞬态吸收动力学即可实现“无损”的动态电荷掺杂：第一束泵浦脉冲激发纳米晶并触发从纳米晶到电荷受体的电荷分离，在纳米晶的带边留下一个多余电荷；在电荷分离完成后，第二束泵浦脉冲再次激发纳米晶，即可探测带多余电荷的纳米晶的激发态动力学。以CsPbBr₃纳米晶为例，该研究团队成功测定了这类纳米晶中带电激子(trion)的俄歇复合寿命。此工作以“‘Intact’ Carrier Doping by Pump - Pump - Probe Spectroscopy in Combination with Interfacial Charge Transfer: A Case Study of CsPbBr₃Nanocrystals”为题发表于《物理化学快报》。

代表性研究成果列表

序号	成果名称	完成人	刊物、出版社或授权单位名称	年、卷、期、页或专利号	类型	类别	研究方向
1	Lead-Free Silver- Bismuth Halide Double Perovskite Nanocrystals	杨斌, 陈俊生, 羊送球, 洪峰, 孙磊, 韩沛耿, Tnnu Pullerits, 邓伟侨, 韩克利	Angewandte Chemie International Edition	2018年 57卷 5457页	论文	第一完成人(非独立完成)	复杂分子体系反应动力学研究

2	Direct observation of forward-scattering oscillations in the H+HD → H-2+D reaction	袁道福, 俞盛锐, 陈文韬, Jiwei Sang, Chang Luo, 汪涛, 徐昕, Piergiorgio Casavecchia, 王兴安, 孙志刚, 张东辉, 杨学明	nature chemistry	2018年10卷653页	论文	非第一完成人(非独立完成)	化学反动力学
3	Observation of the geometric phase effect in the H+HD→H2+D reaction	袁道福, 官亚夫, Wentao Chen, 赵海林, 俞盛锐, Chang Luo, Yuxin Tan, Ting Xie, 王兴安, 孙志刚, 张东辉, 杨学明	Science	2018年362卷6420页	论文	非第一完成人(非独立完成)	化学反动力学
4	Macrophage-Associated PGK1 Phosphorylation Promotes Aerobic Glycolysis and Tumorigenesis	Yajuan Zhang, Guanzhen Yu, 楚慧鄂, Xiongjun Wang, Lingling Xiong, Guoqing Cai, Ruihong Liu, Hong Gao, Bangbao Tao, Wenfeng Li, 李国辉, Ji Liang, Weiwei Yang	Journal of the American Chemical Society	2018年362卷201页	论文	非第一完成人(非独立完成)	分子模拟与设计研究
5	Structural insight into precursor tRNA processing by yeast ribonuclease P	Lan Pengfei, Tan Ming, 张跃斌, Niu Shuangshuang, Chen Juan, Shi Shaohua, Qiu Shuwan, Wang Xuejuan, 彭向达, Cai Gang, Cheng Hong, Wu Jian, 李国辉, Lei Ming	Science	2018年362卷6678页	论文	非第一完成人(非独立完成)	分子模拟与设计研究
6	Electron Transfer into Electron-Accumulated Nanocrystals: Mimicking Intermediate Events in Multielectron Photocatalysis II	王俊慧, 丁韬, 吴凯丰	Journal of the American Chemical Society	2018年140卷10117页	论文	独立完成	光电材料动力学
7	Carrier-doping as a tool to probe the electronic structure and multi-carrier recombination dynamics in heterostructured colloidal nanocrystals	丁韬, 梁桂杰, 王俊慧, 吴凯丰	Chemical Science	2018年9卷7253页	论文	第一完成人(非独立完成)	光电材料动力学

二、队伍建设和人才培养

(1) 实验室队伍的总体情况

固定人员总数 62 名，包括科研、技术人员 59 名，管理人员 3 名。各类人才包括：院士 5 名，万人 4 名，青千 4 名，百千万人才工程 3 名，杰青 7 名，优青 4 名，院百人 7 名。						
正高级 24 名			副高级 26 名		中级 12 名	
中科院院士	研究员	教授级高级工程师	副研究员	高级工程师	助研	工程师

5 名	18 名	1 名	20 名	6 名	10 名	2 名
博士后		博士研究生		硕士研究生		
在站	离站	在读	毕业	在读	毕业	
21 名	4 名	86 名	14 名	45 名	0	

(2) 队伍建设、人才培养与引进情况

2018 年我室继续通过国家，基金委杰青、优青，中组部万人计划、千人计划，省市各类人才计划，中科院各类人才计划以及所级人才计划，大力引进和培养各类人才，所里和实验室分别通过创新基金和自主项目着重向引进人才倾斜。

2018 年队伍建设的成绩如下：

- (1) 张东辉和邓伟侨入选中组部万人计划-科技创新领军人才。
- (2) 孙志刚获基金委杰出青年科学基金项目的支持。
- (3) 肖春雷获基金委优秀青年科学基金项目的支持。
- (4) 杨学明获全国五一劳动奖章。
- (5) 汪涛入选中国科学院青年创新促进会会员。
- (6) 金盛焯、张未卿入选辽宁省“百千万人才工程”百人层次，董文锐、傅碧娜、吴凯丰获万人层次。
- (7) 张未卿受聘为大连化物所“张大煜优秀学者”。
- (8) 李国辉获得大连化物所 2017 年度冠名奖科技创新奖个人奖，吴凯丰获青年优秀奖。
- (9) 新增博士生导师 2 名：傅碧娜、袁开军。
- (10) 新增硕士生导师 3 名：谢华、张跃斌。

2018 年度我室学生获得荣誉及奖学金：杨斌获博士研究生国家奖学金，洪樱月获硕士研究生国家奖学金；杨斌获中科院院长特别奖，何国钟获中科院研究生院优秀研究生导师奖。李博瀚同学获得 2018 年“DICP-Varsal 技术创新奖”中的“仪器/设备创新奖”。

(3) 培养或引进的优秀人才简介

(3.1) 孙志刚

孙志刚，男，博士，1978 年出生，研究员、博士生导师。主要研究方向：量子波包动力学理论方法、化学反应动力学、激光诱导的原子分子动力学及其电子动力学过程。2006 年博士论文获“中科院 50 篇优秀博士论文”称号。已发表 SCI 文章 72 篇，其中在 Science 上发表文章 5 篇，在 PNAS 上发表文章 3 篇，在 JACS、PRL 和 JPCL 上各上 1 篇。2007 年署名的一篇论文获得“中国百篇优秀科技论文”称号。2010 年入选中科院“百人计划”，并于次年获得择优支持，2015 年终期评估为“优秀”。2013 年获大连化学物理研究所“青年优秀奖”称号。2013 年获辽宁省自然科学奖一等奖；2014 年获国家自然科学基金二等奖；2013 年获大连市第五届青年科技奖；2013 年入选辽宁省“百千万人才工程计划”千人层次；2015 年入选辽宁省“十百千人才引进工程”百人层次；2012 年获国家自然科学基金优秀青年基金的支持。2013 年获得首届唐敖庆青年理论化学家奖。2015 年获得“张存浩”化学动力学青年科学家奖，2015 年获得万人计划“青年拔尖人才”支持。2018 年获基金委杰出青年基金支持。

(3.2) 肖春雷

肖春雷，男，博士，1985 年出生，研究员。2013 年 1 月于中科院大连化物所获博士学位并留所工作，获得大连化物所“百人计划”的破格支持。主要研究方向为气相态-态反应动力学，利用激光技术和交叉分子束技术研究基元化学反应。在国内外核心期刊上发表多篇研究论文，其中包括多篇 Science 文章。曾获得 2012 年度中国科学院院长特别奖、2013 年度辽宁省自然科学奖一等奖、2014 年度中国科学院卢嘉锡青年人才奖，2014 年度中国科学院优秀博士学位论文奖，2014 年度国家自然科学基金二等奖；2014 年入选中国科学院青年创新促进会，并获得首批中国科学院“卓越青年科学家”项目资助。2018 年获基金委优秀青年基金支持。

三、开放与合作交流

1. 概述本年度实验室国内外学术交流与合作的主要情况。

2018 年，本实验室科研人员以及在读研究生约有 185 人次出席国内学术会议或讲学，19 人次参加国际学术会议或讲学，25 人次海内外专家学者到实验室访问或进行合作研究。

德国慕尼黑理工大学 Tsugunosuke Masubuchi 博士通过中科院“国际人才 PIFI”-国际博士后计划来所进行为期两年的学术交流。美国埃默里大学连天泉教授作为大连化物所高级访问学者来所进行一个月的访问和合作研究。英国布里斯托大学 Michael Ashfold 教授、南京大学谢代前教授和英国布里斯托大学 Christopher Hanseni 博士等通过分子反应动力学国家重点实验室科学中心基金来访交流。

美国科学院院士、美国明尼苏达大学化学系的校董事讲座教授 Donald G. Truhlar 应我所邀请在生物楼学术报告厅做了题为“Variational Transition State Theory for Complex Chemical Reactions”的第 25 期张大煜讲座特邀学术报告。

2. 公众开放活动的目的意义，开放对象，活动内容，取得成效。

5 月 18、19 日，我所以“我和科学有个约会”为主题的公众科学日活动免费向公众开放。两天内，活动共吸引了来自政府机关、企事业单位、高校、中小学、以及社会各界 13881 名公众前来参观，规模创历年公众科学日活动之最。在“科学游园”环节中，我室提供了“走近高精尖”展区，大家亲自体验“看不见的刀”和“最亮的光”的威力，通过扫描隧道显微镜领略神奇的原子和分子世界，用世界上最快的“摄影机”观察分子反应的实时过程，感受科学金字塔尖的魅力。在“科普讲座”环节中，我室研究员做了“神奇的激光”等讲座，将先进的科学技术用通俗易懂的语言加以阐述。沙国河院士科普团队还为广大儿童带来了保留节目“奇妙的科学实验”，讲座将激光、静电、力与运动、光学、生命等丰富的科学原理知识用一个个炫目的实验演示出来，由于观众参与热情高涨，场地爆满，讲座还临时加讲一场。此外，肖春雷研究员还在所内子女专场讲授了激光方面的科普知识。

我室日常也多次接待各类访问人员，如美国华盛顿大学李晓松教授，辽宁省委、市委书记，青岛市科技局党组书记，大连理工大学、大连海事大学、南开大学、西安电子科技大学、张大煜化学菁英班的师生参观学习。

作为大连化物所基础科研代表性研究单元，我室的对外开放活动向公众充分展示了科学技术对引领经济社会发展、营造人民幸福生活、增强国家综合实力的重大作用，展示了我室科研人员创新的思想理念、扎实的工作作风和具有世界领先水平科研成果。

3. 实验室作为本领域公共研究平台的作用，大型仪器设备的开放与共享情况。

2018 年度，国内外多人次通过开放课题和合作培养研究生等机制，利用本室的研究实验系统和计算机机群，进行和研究工作。我室设备的特点是专用性高且开放共享，在具体的使用和运行管理方面，有以下措施：

- (1) 实验室的实验系统均采取免费服务。
- (2) 所有设备都对全室和室外用户开放，原则上室外用户优先使用。
- (3) 实验室设立开放课题，室外用户可以随时自主申请开放课题。

(4) 合作培养研究生是非常卓有成效的开放方式，因为合作培养的研究生可以在我室复杂的实验研究系统上进行长时间的训练和学习，从而得到非常好的研究成果。

四、专项经费执行情况与效益分析

1. 自主研究课题的设置及执行情况。

我室安排自主课题 6 项，合计总额为 274 万元。我室自主课题主要用于资助新引进人才、培育具有良好发展潜力的新的研究课题以及研发新的先进的物理化学实验和理论研究技术、仪器和方法。

- (1) 超快红外光谱研究离子和压力对水分子结构动力学影响的等效性研究

负责人：袁开军

执行情况：

在重点实验室自主课题的资助下我们建立了开展高压实验所需要的荧光压力标定显微探测系统。利用搭建的高压荧光光谱探测系统，我们开展了近红外荧光碳点的高压荧光光谱研究。我们还结合超快瞬态吸收光谱，探究高压条件下 MoS₂ 的激子动力学变化规律。以上工作目前正在撰写文章发表。

(2) 采用电荷掺杂量子点模拟多电子光催化反应电荷转移动力学

负责人：吴凯丰

执行情况：

采用电荷掺杂纳米晶量子点构建模型体系，结合飞秒瞬态吸收光谱动力学测试，揭示了纳米晶在多电子光催化和光电转换应用中的一系列重要动力学过程。相关工作发表于两篇《美国化学会志》(Journal of the American Chemical Society) 上。

(3) 中性金属团簇与资源小分子的反应机理研究

负责人：谢华

执行情况：

利用自主研发的团簇 IR-VUV 光谱实验装置，进行了一系列中性团簇光谱与动力学研究。1、利用大连相干光源，对中性水团簇进行 IR-VUV 进行了研究，成功测得了水团簇正离子的质谱以及中性水团簇二聚体的红外谱图，并且比较了不同 VUV-FEL 激光能量下水团簇的质谱，发现在能量更高 (21uJ) 的情况下，(H₂O)₂ 相对较强。另外，水二聚体的红外谱图在进一步理论分析中。2、为了实现中性金属团簇与 CH₄ 的反应机理，获得常规实验方法难以得到的中性团簇的红外光谱，深入研究中性金属团簇的原子数目及组分对 C-H 等键解离活化的调制作用，在现有的实验装置上对其进行改造。

(4) 基于桌面激光的极紫外超快光源

负责人：周传耀

执行情况：

已按计划设计加工用于高次谐波产生的真空腔体和气体靶源，并初步开展高次谐波产生实验，正在进一步优化。

(5) MoS₂ 二维材料中缺陷态电荷迁移动力学研究

负责人：田文明

执行情况：

项目实施过程中我们成功采用机械剥离的方法制备出了单层的 MoS₂ 材料，并且构建了 MoS₂ 与 MAPbI₃ 钙钛矿间的复合体系，我们采用定点激发的形式激发复合体系中的 MoS₂ 材料，然而并没有观察到 MAPbI₃ 钙钛矿的荧光动力学，经过多次尝试没有观察到 MoS₂ 材料中缺陷态电荷的长距离迁移过程，也没有观

察到缺陷态电荷转移给 MAPbI₃ 钙钛矿的过程，因此本课题的探索并没有成功。但同时我们也开展了 2D 钙钛矿的相关动力学研究工作：1. 制备了不同层数相纯的 2D 钙钛矿单晶材料 ((BA)₂MA_n-1Pb_nI_{3n+1}, n=1 ~ 6)；2. 测量了 2D 钙钛矿单晶材料的本征载流子动力学信息；3. 2D 钙钛矿单晶边界态的调控研究。

(6) 酸性磷脂对整合素 α L β 2 跨膜区稳定性的理论研究

负责人：楚慧郢

执行情况：

根据前期预定研究内容，已经完成课题研究目标。已利用已购买的机时进行了高精度力场的计算，针对接近跨膜区与不同磷脂组成的情况下进行分子动力学研究。动力学的结果表明， α L β 2 双体的界面氨基酸 N 末端侧是通过疏水残基间的相互作用来稳定的，而 C 末端由于大量带电氨基酸残基的存在，除了疏水残基间的相互作用也包含了带电残基间的静电相互作用共同稳定了双体间 C 末端的构象。同时，由于带电残基的存在，这类残基就可以与酸性磷脂相互作用，此类相互作用也对 α L β 2 双体的构象有稳定作用。Trimeric interaction among α L, β 2 and acidic phospholipid. 文章已被 PLOS Biology (<https://doi.org/10.1371/journal.pbio.2006525>) 接收 (IF9.163)。

2. 开放课题的设置及执行情况。并简要介绍 1-2 项利用开放基金完成的优秀成果。

分子反应动力学的研究投入大，因此我室尽量满足各科研机构利用我室设备和条件进行研究的需求。2018 年我室安排开放课题共 19 项，当年支出经费 39.5 万元，共发表 SCI 研究论文 19 篇。重要进展如下：

青岛大学楚天舒教授利用实验室开放课题的资助，采用密度泛函和含时密度泛函理论计算方法，详细研究了联吡啶苯酚 (bpy-phenol) 和 3, 7-二羟基-2-苯基-6-3-苯基-4H-色烯-4-酮 (DPPCO) 分子的激发态动力学行为。研究表明，bpy-phenol 分子在和 F⁻ 离子发生激发态质子耦合电子转移反应之后，还会跟着发生一个激发态质子转移反应，生成一个具有两性离子特性的 bpy-phenol 异构体，这个异构体可以解释实验中的超红移荧光现象；DPPCO 分子在被光激发之后会发生多步骤的激发态质子转移反应，其转移机理会分别受到氢键键长、质子转移能垒高度和转移前后反应物和产物的能量差等多方面的因素影响。我们推断，

质子转移过程本身并不会导致荧光的猝灭,而应该是质子转移之后分子构型的改变打开了新的非辐射通道。本年度共发表 SCI 论文 5 篇。

厦门大学郑兰荪院士利用实验室开放课题的资助,与我室杨学明院士、马志博副研究员以及芬兰于韦斯屈莱大学 Hannu Hakkinen 教授合作,通过低温超高真空扫描隧道显微镜 (STM) 研究原子结构精确已知的 Ag₃₇₄ 纳米团簇的表面配体,获得亚分子水平超高分辨,结合 DFT 理论计算与模板识别算法,实现对表面配体形貌和结构以及团簇取向的识别。相关研究工作成果发表在《自然·通讯》(Nat. Commun.) 上。

五、依托单位的支持

1. 依托单位在人、财、物条件方面的保障和支持 (应与填报的数据一致)。

类别	2017 年度	2018 年度	增长数	增长比率
专职管理人员 (个)	3	3	0	0
专业技术人员 (个)	6	6	0	0
硕士研究生招生 (个)	12	13	1	8.3%
博士研究生招生 (个)	5	2	-3	-60%
单位配套运行费 (万元)	0	0	0	0
单位配套设备费 (万元)	0	0	0	0
实验室总面积 (平米)	11281	11281	0	0
实验室总资产 (万元)	27605	39446	11841	42.89%

2. 依托单位给予的其他支持

在 2018 年期间,实验室从大连化物所获得各种资助 1688 万元,主要包括大连光源基金、十三五择优支持、自主部署、青年基金,以及资助本室院士、杰青、青千以及其他青年人才等各类人才基金。从中国科学院获得的资助总额 2308 万,主要用于资助中科院的先导专项,国际大科学计划培育项目,洁净能源创新研究院项目等,以及院级各类人才如国际访问学者、青促会会员等。

实验室主任：张东辉院士

学委会主任：郑兰荪院士

2018 ANNUAL REPORT

中国科学院大连化学物理研究所
分子反应动力学国家重点实验室

地址：大连市沙河口区中山路457号
[http: www.skimr.dicp.ac.cn](http://www.skimr.dicp.ac.cn)