



分子反应动力学 国家重点实验室 年度报告

2017



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 127 项，实到经费 7405.38 万元，国家重点实验室专项资金的科研经费为 4261 万元，总经费为 19071.76 万元。其中科技部和基金委项目 72 项，经费 4397.94 万元。中科院经费 1584.73 万元，其他省部级经费 461 万元，大连化物所经费 777 万元。承担的项目包括科技部国家重点研发计划、国家重大科学仪器设备研制专项，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、重大科研仪器研制项目、科研装备研制项目，中组部万人计划和青年千人等各类人才项目，以及大连化物所的创新基金等。所有研究项目都按计划进行或结题。我室安排自主课题 7 项，合计总额为 216 万元。

2017 年我室研究人员共发表 SCI 文章 115 篇，其中化学学科 1 区文章共 28 篇，占总论文数的 24.3%。

1. 承担任务

新增的项目包括主持 1 项基金委科学中心项目，1 项杰青项目，1 项青年千人项目，1 项科技部国家重点研发计划，以及 1 项中科院重大科研仪器研制项目。

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	动态化学前沿研究	21688102	杨学明，大连化物所	2017.1-2021.12	8500	2344	基金委	主要负责	科学中心	化学反应动力学
2	表面反应动力学综合实验装置	ZDKYYQ20170003	任泽峰，大连化物所	2017.5-2020.4	1086	500	中科院	主要负责	重大科研仪器研制项目	化学反应动力学
3	理论与计算生物物理化学	21625302	李国辉，大连化物所	2017.1-2021.12	400	185	基金委	主要负责	杰青	分子模拟与设计
4	纳米结构与功能预测的理论方法和模型发展	2017YFA0204801	邓伟侨，大连化物所	2017.7-2022.6	635	425	科技部	主要负责	国家重点研发计划	材料的动力学模拟与设计研究

5	材料模拟与设计	21525315	吴凯丰, 大连化物所	2016. 1-2020. 12	400	175	中组部	主要负责	青年千人	光电材料动力学研究
---	---------	----------	------------	------------------	-----	-----	-----	------	------	-----------

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：非铅钙钛矿发光动力学机理研究取得新进展

近年来，含铅钙钛矿 $APbX_3$ ($A=Cs, CH_3NH_3, X=Cl, Br, I$) 被广泛应用于太阳能电池、发光二极管 (LED)、纳米激光器、以及光探测器等方向。虽然含铅钙钛矿具有众多优势，但是铅对环境和人体有害，而且含铅钙钛矿在空气中很容易分解，不利于大规模商业化应用。因此寻找毒性低且稳定性好的钙钛矿很有必要。韩克利研究团队采用溶液法一步合成了含 Bi 的钙钛矿 ($Cs_3Bi_2Br_9$) 纳米晶。通过研究其时间分辨发光光谱，以及飞秒瞬态吸收光谱，发现晶体表面的缺陷态是限制其发光效率的重要因素，选取合适的表面活性剂（例如油酸）可以抑制其表面缺陷态，并且发光效率可提升二十多倍。此外，该材料在空气中具有较好的稳定性，可以在湿润环境下存放超过 1 个月。这些性质表明含 Bi 钙钛矿具有很好的应用潜力。

代表性研究成果2：全无机钙钛矿光电探测器动力学研究取得新进展

光电探测器在信号处理、通讯、生物成像等领域发挥着重要作用。然而目前基于全无机钙钛矿的光电探测器无法同时实现高灵敏度和快速响应。例如， $CsPbBr_3$ 钙钛矿薄膜具有较高陷阱态密度，而基于 $CsPbBr_3$ 钙钛矿单晶光电探测器的电荷收集效率很低。因此基于这些材料的光电探测器通常灵敏度较低，响应时间长。低缺陷态密度、高载流子迁移率以及有效的电荷收集是实现高性能光电探测器的重要因素。韩克利研究团队于 2016 年成功制备出有机-无机杂化钙钛矿微晶 (ACS Appl. Mater. Interfaces 2016, 8, 19587-19592)。在此基础上采用溶液法快速合成了具有较低缺陷态密度的 $CsPbBr_3$ 微晶。研究其时间分辨发光光谱，发现单光子激发的荧光衰减动力学依赖其发光波长，而双光子激发的荧光衰减动力学与发射波长无关。分析表明 $CsPbBr_3$ 微晶激发态载流子存在快速扩散行为，并且载流子迁移率超过 $100\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1}$ 。通过构建 $CsPbBr_3$ 微米尺度的光电探测器可以实现高效的电荷收集，该光电探测器具有超高的响应度

(104A/W)，刷新了目前有报道的全无机钙钛矿光电探测器的最高值，而且可以同时实现单光子和双光响应。此外该光电探测器具有快速响应时间（1ms）。该工作为制备高性能光电探测器提供了新思路。

（1.2） 化学反应动力学

代表性研究成果3：成功研制世界上最亮的极紫外自由电子激光装置—大连光源

由我所和上海应用物理研究所（以下简称“上海应物所”）联合研制的极紫外自由电子激光装置—大连光源，在2016年9月底安装完成首次出光之后，经过三个多月卓有成效的调试之后，1月15日，总长100米的自由电子激光装置终于发出了世界上最强的极紫外自由电子激光脉冲，单个皮秒激光脉冲可产生140万亿个光子（ 1.4×10^{14} 光子/脉冲），成为世界上最亮且波长完全可调的极紫外自由电子激光光源。

自由电子激光是国际上最先进的新一代先进光源，也是当今世界先进国家竞相发展的重要方向，在科学研究、先进技术、国防科技发展中有着重重要的应用前景。先进自由电子激光的发展在前沿科学研究中发挥着越来越重要的作用，特别是近十年来，自由电子激光技术的发展和突破为探索未知物质世界、发现新科学规律、实现技术变革提供了前所未有的研究工具。已经建成的大连光源是我国第一台大型自由电子激光科学研究用户装置，是当今世界上唯一运行在极紫外波段的自由电子激光装置，也是世界上最亮的极紫外光源。光源的每一个激光脉冲可产生超过100万亿个光子，波长可在极紫外区域完全连续可调，具有完全的相干性；该激光可以工作在飞秒或皮秒脉冲模式，可以用SASE（自放大自发辐射）或HGFG（高增益谐波放大）模式运行。这一先进光源在化学、能源、物理、生物、环境等重要研究领域有着广泛的应用，我国率先建成这一先进光源对于推动我国乃至世界在这些研究领域的研究发展有着极其重要的意义。同时，这一光源的成功研制为我国未来发展X波段的自由电子激光打下了坚实的基础。

大连光源项目得到了国家自然科学基金委国家重大仪器专项的资助，由我所和上海应物所联合研制，项目于2012年初正式启动，2014年10月正式在长兴岛开工建设。正式开工建设以来，在两年的时间里完成了建设工程以及主体光源装置的研制，并且在很短的时间内调试成功产生了世界上单脉冲最亮的极紫外激光，创造了我国同类大型科学装置建设的新记录。这一项目也开创了我国科学研究专家与大科学装置研制专家成功合作的先例，对于未来加快推动大科学装置在

科学研究中的应用具有重要的现实意义。我所以及上海应物所的项目专家将进一步努力将大连光源建设成为高水平的实验研究用户装置,为我国乃至世界提供一个独特的科学研究装置。

此次大连光源正式出光后,为向社会各界积极正面地展示这一重要科研成果及其深远意义,我所在长兴岛所区召开“世界最亮极紫外自由电子激光装置——‘大连光源’研制成功”媒体见面会。人民日报、新华社、光明日报、经济日报、中国日报、中央人民广播电台、中央电视台、科技日报等 19 家中央主流媒体和省市媒体的记者出席会议。此外,该成果也被美国顶级期刊 Science 杂志报道。

代表性研究成果4：瓦尔登 (Walden) 翻转取代反应机理研究取得新进展

发生在四面体环境碳原子上、经由背面攻击瓦尔登 (Walden) 翻转机理实现的反应是化学中最重要和最有用的—类反应。张东辉研究团队对其中最简单的 $H' + CH_4 \rightarrow CH_3H' + H$ 取代反应及其同位素类似物进行了精确的量子动力学研究。他们发现反应的阈值能量远大于势垒高度,并且反应显示出不同的同位素效应: 阈值能量以上的反应截面具有很强的正向二级同位素效应,而反应的热速率常数表现出反向二级动力学同位素效应。进一步分析表明,不反应 CD_3 基团的伞形运动在反应期间对入射 H 原子的攻击响应非常缓慢,反应并没有经过最小能量路径,取而代之伞形角在动力学过渡态处大于 90° , 对应的势垒高度大于静态势垒高度。这是首次对一个通过瓦尔登翻转机理实现的取代反应进行精确的理论研究,获得了详尽的动力学信息和清晰的物理图像。造成不同同位素效应的机理也极可能在气相 SN_2 反应中发挥重要的作用,从而为 SN_2 反应动力学研究提供了重要线索。

(1.3) 超快时间分辨光谱与动力学

代表性研究成果5：钙钛矿纳米线中载流子定向输运研究取得新进展

金属有机钙钛矿 $MAPbX_3$ ($MA=CH_3NH_3^+$; $X=Cl^-, Br^-, I^-$) 材料在光伏和光电器件等领域展现出的优越性能引起了相关科研人员的广泛关注。在以钙钛矿材料为基础的器件中,长距离载流子迁移对于制备高性能器件是必不可少的。目前,已报道的在钙钛矿多晶和单晶中载流子扩散距离可达到微米尺度。除利用钙钛矿材料本征的载流子浓度驱动的扩散迁移性质以外,人们还试图通过纳米尺度化学调控的方式进一步提升载流子输运性能。为实现这一个目标,金盛烨研究团队发展了一种“固-固”卤素离子交换的方法,合成了含有卤素梯度的 $MAPbBr_xI_{3-x}$

单晶纳米线；其中，纳米线的一端富含溴元素（高能带），另一端富含碘元素（低能带），通过两端的能级梯度成功实现了载流子的定向迁移。通过时间分辨荧光成像和动力学测量发现载流子可以定向的从溴浓度高的区域（高能带）迁移到几微米距离外的高碘浓度区域（低能带）。与本征的载流子迁移过程相比，该能级梯度驱动的载流子输运过程具有明确的单一方向性，使这种纳米线在长距离光能捕获与运输、提高光生载流子利用效率等方面和纳米光电子学领域有着非常广阔的应用前景。

代表性研究成果6：发现二维钙钛矿薄膜内部光生电荷自分离现象

二维（2D）层状钙钛矿材料 $(A)_2(CH_3NH_3)_{n-1}MnX_{3n+1}$ ，A 为有机长链分子，M 为金属阳离子，X 为卤素离子）具有独特的几何结构、可变的带隙能量和较高的稳定性，在光伏和光电器件等领域受到广泛关注。金盛焯研究团队采用飞秒瞬态吸收光谱及荧光光谱技术对包含不同 n 值的 2D 层状钙钛矿薄膜及其载流子动力学进行了研究。通过对比在薄膜正反两面激发得到的实验数据，发现这些不同组分的 2D 钙钛矿层在沿垂直基底的方向上是按照一定顺序（n 值由基底向外逐渐增大）排列的。受这些有序排列的 2D 钙钛矿层的能级驱动，薄膜内部光诱导产生的电子和空穴会在垂直于基底的方向上发生自发性的电荷（电子和空穴）分离：即电子从小 n 到大 n 方向转移，而空穴的转移方向则相反。这种自发性的内部电荷分离可导致电子和空穴分别累积在薄膜的上下表层，将有助于提高光生电荷的界面提取效率。这一发现可促进 2D 层状钙钛矿薄膜在太阳能转换和光电探测等领域的应用。

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, Air-Stable All-Inorganic Cesium Bismuth Halide Perovskite Nanocrystals	杨斌, 陈俊生, Feng Hong, 毛鑫, Kaibo Zheng, 羊送球, 李雅娟, Tnu Pullerits, 邓伟侨, 韩克利	Angewandte Chemie International Edition	2017 年 56 卷 12471 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	Ultrasensitive and Fast All-Inorganic Perovskite-Based Photodetector via Fast Carrier Diffusion	杨斌, 张凤英, Junsheng Chen, 羊送球, Xusheng Xia, Tõnu Pullerits, 邓伟侨, 韩克利	ADVANCED MATERIALS	2017 年 29 卷 1703758 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

						成)	
4	Dynamical barrier and isotope effects in the simplest substitution reaction via Walden inversion mechanism	赵志强, 张兆军, 刘舒, 张东辉	NATURE COMMUNICATIONS	2017年8卷 14506页	论文	独立完成	化学反应动力学
5	Long-Distance Charge Carrier Funneling in Perovskite Nanowires Enabled by Built-in Halide Gradient	田文明, 冷静, 赵春一, 金盛烨	Journal of the American Chemical Society	2017年139卷 579页	论文	独立完成	超快时间分辨光谱与动力学
6	Observation of Internal Photoinduced Electron and Hole Separation in Hybrid Two-Dimensional Perovskite Films	刘俊学, 冷静, 吴凯丰, 张军, 金盛烨	Journal of the American Chemical Society	2017年139卷 1432页	论文	独立完成	超快时间分辨光谱与动力学

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 71 名，包括科研、技术人员 68 名，管理人员 3 名。各类人才包括：院士 5 名，万人 2 名，青千 4 名，百千万人才工程 3 名，杰青 6 名，优青 4 名，院百人 6 名。						
正高级 23 名			副高级 28 名		中级 20 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	17 名	1 名	23 名	5 名	17 名	3 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	
20 名	3 名	84 名	12 名	38 名	0	

(2) 队伍建设、人才培养与引进情况

2017 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。

2017 年队伍建设的业绩如下：

- (1) 张东辉获选中国科学院院士。
- (2) 杨学明荣获全国创新争先奖奖状。
- (3) 张东辉荣获国务院政府特殊津贴。
- (4) 张东辉负责的分子反应动力学研究团队入选创新人才推进计划重点领域创新团队，邓伟侨入选中青年科技创新领军人才。
- (5) 金盛焯获基金委杰出青年科学基金项目的支持。
- (6) 傅碧娜获基金委优秀青年科学基金项目的支持。
- (7) 引进中组部青千 1 名：吴凯丰。
- (8) 张东辉受聘中科院特聘研究员“特聘核心骨干”，邓伟侨、孙志刚、李国辉等入选“特聘骨干人才”。
- (9) 周传耀入选中国科学院青年创新促进会会员。
- (10) 李国辉、邓伟侨入选辽宁省第十批“百千万人才工程”百人层次，汪涛获万人层次。
- (11) 张东辉荣获“辽宁杰出科技工作者”称号
- (12) 沙国河获大连市关心下一代工作终身成就奖。
- (13) 张东辉受聘为大连化物所“张大煜杰出学者”；孙志刚、金盛焯等受聘为“张大煜优秀学者”；傅碧娜、吴凯丰、肖春雷等受聘为“张大煜青年学者”。
- (14) 大连光源研发团队（项目负责人：杨学明）获得大连化物所 2016 年度冠名奖特别贡献奖，金盛焯获人才贡献奖，傅碧娜获青年优秀奖。
- (15) 任泽峰、孙志刚受聘为分子反应动力学国家重点实验室副主任。
- (16) 成立光电材料动力学创新特区研究组（11T6 组），聘任吴凯丰为创新特区研究组组长。
- (17) 新增博士生导师 5 名：任泽峰、吴国荣、肖春雷、董文锐、吴凯丰
- (18) 新增硕士生导师 3 名：刘舒、冷静、汪涛。

2017 年度我室学生获得荣誉及奖学金：金闲驰获博士研究生国家奖学金，董珊珊获硕士研究生国家奖学金；陈俊的学位论文获得中科院优秀博士学位论

文，张东辉获中科院研究生院优秀指导教师奖。贺志刚同学获得 2017 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) 金盛烨

金盛烨，男，博士，1978 年出生，研究员，博士生导师。2001 年于大连理工大学获得学士学位，2010 年于美国 EMORY 大学获得博士学位，2010-2013 年在美国阿贡国家实验室和美国西北大学从事博士后研究。2013 年 12 月加入中科院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室，任超快时间分辨光谱和动力学研究组组长。研究方向主要从事超快时间分辨光谱、时间分辨动力学成像、光电转化材料与动力学等方面的研究。截至目前，在 JACS, Angew Chem, Nano Letter 等领域内知名期刊共发表 SCI 论文 30 余篇，总引用 900 余次。2014 年入选中组部青年千人计划，2017 年获得国家杰出青年科学基金项目资助。

(3.2) 傅碧娜

傅碧娜，女，博士，1981 年出生，研究员，硕士生导师。2004 年于大连理工大学物理系获学士学位，2009 年于中国科学院大连化学物理研究所获博士学位。2009 年到美国埃默里 (Emory) 大学化学系从事博士后研究。2012 年以“所百人计划”引进回大连化学物理研究所工作至今。研究方向主要为气相多原子分子反应以及气相-表面化学反应的势能面构建和动力学理论研究。至今在 Nature Communcations, PNAS, JACS 等国际高水平期刊发表 SCI 论文 45 篇。先后获中科院卢嘉锡青年人才奖，中科院沈阳分院第四届优秀青年科技人才奖，入选中科院青年创新促进会会员，辽宁省“百千万”工程万层次，大连市青年科技之星，获中科院大连化物所冠名青年优秀奖等。2017 年获国家自然科学基金委优秀青年基金资助。

(3.3) 吴凯丰

吴凯丰，男，博士，1989 年出生，研究员，博士生导师。2010 年于中国科学技术大学材料科学与工程系获得理学学士学位；之后在美国埃默里大学从事超快光谱学研究，师从连天泉教授，2015 年获得物理化学博士学位；2015 至 2017 年在美国洛斯阿拉莫斯国家实验室以主任奖学金学者身份从事博士后研究工作，合作导师为 Victor Klimov。2017 年入选中组部青年千人计划，并入职中科院大

连化学物理研究所，被聘为分子反应动力学国家重点实验室研究员，任光电材料动力学研究组组长，从事光电转换材料的超快动力学和器件应用研究，近五年内在 Science、Nature Nanotech.、Nature Energy、Chem. Soc. Rev.、Acc. Chem. Res.、J. Am. Chem. Soc.、Nano Lett.、ACS Nano、Chem. Sci.等国际知名学术期刊上发表论文近 40 篇。

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。

2017 年，本实验室科研人员以及在读研究生约有 186 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，22 人次海内外专家学者到实验室访问或进行合作研究。

美国劳伦斯伯克利国家实验室 Musahid Ahmed 教授和瑞典哥德堡大学 Krems Roman 教授通过中科院“国际人才 PIFI”-国际访问学者计划来访并进行学术讲座和交流。此外，德国马普协会弗里茨·哈伯研究所 André Fielicke 教授、美国普林斯顿大学 Annabella Selloni 教授、美国马凯特大学黄吉儿教授、中科院物理所范桁研究员等通过分子反应动力学国家重点实验室开放基金来访交流。

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 19、20 日中国科学院大连化学物理研究所园区，300 名由院士、青年科技管理工作者和研究生组成的科普志愿者队伍为广大公众联合奉献了一场为期两天的科学盛宴。今年公众科学日的主题是：在这里爱上科学。4 大展区，26 个实验室向公众开放展示；14 场内容各具特色的科普讲座面向公众宣讲，此外还有《说能解源》微视频首映和科技成果产业化专题展等特色活动。活动吸引了来自社会各界 9000 名公众来所。我室作为重要展点之一接待了约 6000 名来自大、中、小学校的青少年学生和社会公众参观者。沙国河院士的科普讲座“奇妙的科学实验”一直是我所公众科学日的保留节目。19、20 日的报告，500 人的会议中

心座无虚席，舞台上摆放的一件件神奇的科普教具非常“吸睛”，沙院士就像一个神奇的魔术师，将激光、静电、力与运动、光学、生命等丰富的科学原理知识用形象的实验演示出来，小观众们还可以亲自参与沙爷爷的实验。此外，我室还开放了扫描隧道显微镜——你我眼中的原子分子、光电子速度成像——影像剖析分子结构以及飞秒化学技术——分子运动的实时摄影等三个展点，并均被评为优秀展点。沙国河院士获 2017 年度大连市关心下一代工作终身成就奖。

今年陆续有：国务院办公厅调研员兼副处长张海波带队的国务院办公厅机关党校进修班一行 5 人，和君商学董事长助理、和君商学院运营负责人潘番和君集团辽宁和融企业管理咨询有限公司董事长里明一行 3 人，厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室青年委员会一行 13 人，中国科学院上海有机化学研究所副所长唐勇一行 9 人等到我室参观调研。

此外，大连海事大学物理学院大三学生 31 名师生、南开大学物理学院科研实践团 30 名师生、大连理工大学与我所联合培养的 2015 级张大煜化学菁英班近 20 名学生等到我室星海二站所区和长兴岛园区参观交流。

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。

2017 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用免费服务。
- (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。

我室安排自主课题共 7 项，合计总额为 216 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) 非共线和频振动光谱信号放大装置

负责人：任泽峰

执行情况：

自主设计和完成了飞秒光参量放大器(OPA)的搭建，整体性能与进口的 OPA 相当，稳定性更好。

(2) LT-STM 研究金属纳米团簇的形貌及电学性质

负责人：马志博

执行情况：

利用低温扫描隧道显微镜研究了原子结构已知的银纳米团簇表面配体的形貌，结合高分辨 STM 图像与理论计算识别出各向异性的纳米团簇在表面的吸附取向与配体分布，为进一步实现单个团簇的分子原子尺度研究奠定基础。

(3) 二维钙钛矿单晶与半导体量子点间的能量转移动力学研究

负责人：金盛焯

执行情况：

利用溶液中程序降温的方法制备了 2D 钙钛矿单晶 ($(\text{BA})_2\text{MAn-1PbnI}_{3n+1}$, $n=1, 2, 3$)；利用荧光扫描动力学成像显微镜系统对其进行了荧光光谱和荧光寿命检测。

(4) 基于大连相干光源的中性团簇红外光谱研究

负责人：谢华

执行情况：

采用 IR-VUV 光谱测试方法研究了中性甲胺二聚体，结合量子化学计算以及从头算分子动力学模拟方法解释了实验得到的光谱特征；另外对三甲胺二聚体中性团簇在 $2500\text{--}3800\text{cm}^{-1}$ 范围进行了研究，实验与理论计算结合揭示了多种异构体共存的可能性；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

(5) 基于高通量分子动力学模拟研究分子的识别机理及实验验证

负责人：张跃斌

执行情况:

以癌细胞生长调控的重要蛋白 CRM1 (chromosome region maintenance 1) 为研究实例, 通过高通量分子动力学模拟的高效采样方案研究其抑制剂的分子识别机理和动态响应过程: 发现 CAPE 为 CRM1 蛋白小分子抑制剂的工作已发表, 并于近期入选 Chem Biol Drug Des 杂志 2017 年 5 月期的封面故事(cover story); 发现中药莱菔子有效化学成分 LFS-01 为 CRM1 蛋白小分子抑制剂的工作已由 Chemico-Biological Interactions 杂志审稿并修回。

(6) 液相体系中生物碱基吸附电子的分子反应动力学研究

负责人: 羊送球

执行情况:

利用泵浦-探测飞秒瞬态吸收光谱仪器测量了亚铁氰化钾和碘化钾的水溶液, 以及它们和生物碱基混合溶液的瞬态光谱。观察到亚铁氰化钾水溶液在 320 纳米的飞秒泵浦激光照射下有水合电子生成, 而碘化钾溶液中没有观察到明显的水合电子信号。也没有观察到亚铁氰化钾和生物碱基混合溶液中生物碱基吸附到水合电子的信号。

(7) 选择性检测单胺氧化酶两种亚型的双光子比率荧光探针的设计、应用及激发态机理研究

负责人: 楼张蓉

执行情况:

利用激发态分子内质子转移机理, 采用具有双光子吸收特性的荧光母体, 结合单胺氧化酶的活性基团, 设计、合成并筛选出了一类用于选择性检测生物体系内单胺氧化酶活性的双光子比率荧光探针, 已分别在 Acta Phys. Chim. Sin. 和 J. Phys. Chem. C. 发表文章。

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。2017 年我室安排开放课题共 17 项, 当年支出经费 31.5 万元, 共发表 SCI 研究论文 12 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 2-(2-羟苯基)苯并噻唑衍生物荧光探针分子 HBTPP-S 检测硫化氢的荧光机理以及 2,5-双(苯并噻唑-2-基)噻吩-3,4-二醇分子的激发态分子内双质子转移机理。研究结果表明,生物荧光探针分子的荧光检测机理应归因于激发态质子转移、分子内电荷转移和光诱导电子转移;2,5-双(苯并噻唑-2-基)噻吩-3,4-二醇分子的双质子转移机理是逐步转移机理,而不是同步转移机理。本年度共发表 SCI 论文 5 篇。

辽宁大学宋朋教授利用实验室开放课题的资助,以研究在荧光探针和分子器件等功能性材料体系的激发态多质子转移机理为目标,采用密度泛函(DFT)及含时密度泛函(TDDFT)方法,研究分子内含有多个氢键链的分子以及含有多种氢键结合位点并周围不同种质子溶剂形成分子间多氢键的一类分子在激发态上发生多质子转移的转移机理。通过分析体系中激发态氢键行为以及中间体的性质,研究了这些分子体系的激发态反应特性,并确定了激发态多质子转移的最佳路径。进一步通过对比不同性质的氢键链引发的激发态多质子转移的反应机理,阐述激发态多质子转移中的溶剂效应以及氢键作用。在此基础上,研究了复杂溶剂环境中的激发态多质子转移机理,并探索了通过复杂氢键链来人为调控激发态多质子转移反应。此外,依托本项目还对激发态质子转移过程中究竟发生在 $\pi\pi^*$ 态还是 $\pi\sigma^*$ 态,或是两者并存态进行了深入探索,对功能性分子体系激发态失活过程机制进行了有益的补充,取得了一定的研究成果。本年度共发表 SCI 论文 4 篇。

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	2016 年度	2017 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)	5	6	1	20%
硕士研究生招生(个)	9	12	3	33%

博士研究生招生（个）	15	5	-10	-67%
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）	5861	11281	5420	92.5%
实验室总资产（万元）	27605	35666	8061	29.2%

2. 依托单位给予的其他支持

在 2017 年期间，实验室从大连化物所获得各种资助 777 万元，主要用于资助本室院士、杰青、青千以及其他青年人才等各类人才。从中国科学院获得的资助总额 1585 万，主要用于资助先导项目，重大科研仪器研制项目，国际大科学计划培育专项，实验室仪器升级改造，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

2017 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)