

理论室 Laboratory of Theoretical and Computational Nanoscience

理论室第14期学术报告



报告题目：从分子间碰撞传能到冷分子反应动力学

报告人：谢代前教授，南京大学

报告时间：2023年4月20日（星期四）下午 14:00

报告地点：南楼二层会议室

邀请人：高兴发研究员

摘要：

分子碰撞传能是基本的化学过程之一，在大气化学、化学激光、星际化学和燃烧过程等重要领域都有广泛的应用。将介绍我们新近发展的高效的包含最近邻耦合的非含时传能动力学新方法，获得了HF化学激光器中重要的 H_2-HF 和 $HF-HF$ 传能过程的速率常数等态-态动力学性质，并与统计量子模型结合研究了超冷分子反应 $KRb+KRb$ 等体系的量子动力学，揭示了新的微观动力学机制。

报告人简介：

谢代前，南京大学特聘教授，博士生导师，合肥国家实验室双聘PI，国家杰出青年基金获得者，国家自然科学基金重点项目和重大课题主持者，中国化学会化学动力学专业委员会副主任。1983年6月在四川大学获理学学士学位，1988年12月在吉林大学获理学博士学位，师从唐敖庆院士。研究领域为理论与计算化学，在高精度分子势能面的构建及量子动力学研究方面取得较好进展，揭示了若干重要反应过程的微观动力学机制，已在 Science (3 篇,与实验合作)、Nature(1篇,与实验合作)、Nature Photonics (1篇)、PNAS (4篇)、J. Am. Chem. Soc.(5篇)、Nature Comm.(5篇)等重要学术期刊上发表论文400余篇。曾获中国化学会青年化学家奖 (1998)、教育部高校青年教师奖 (2002)。