

附件：研究集体公示内容模板

# 前沿分子动力学研究集体

大连化学物理研究所

研究集体主要科技贡献：

分子反应动力学是在微观层次上研究化学反应详细机制的学科，是化学学科的基础，联系物理和化学的桥梁。在过去五年中，前沿分子动力学研究团队发展了各种态-态量子波包理论和精确拟合势能面的方法，改进了利用里德堡态标示时间飞渡谱技术的交叉分子束装置。同时，针对国际前沿反应动力学问题，理论和实验密切结合，做出了一系列原创性的基础学科研究突破，包括阐明了反应散射共振的在化学反应中的普遍性问题，首次揭示了几何相位效应在化学反应中的作用的问题，研究了各种不同振动模式对于化学反应的影响等等。共发表 SCI 收录论文 100 余篇，包括在 Science 和 Nat. Chem. 期刊各发表论文两篇，在 Nat. Comm. 上发表论文三篇等。自 2006 年以来，该团队共在 Science 期刊上发表论文 9 篇。

**研究集体突出贡献者及主要科技贡献：**

**突出贡献者姓名：**张东辉

**工作单位：**大连化学物理研究所

**主要科技贡献：**发展了高维量子波包方法和基于神经网络高精度拟合势能面的方法，研究了分子各种振动模式对于化学反应的影响

**突出贡献者姓名：**孙志刚

**工作单位：**大连化学物理研究所

**主要科技贡献：**发展了高效的基于量子波包方法的态-态分子反应动力学理论方法，研究了反应共振态和几何相位对化学反应的影响

**突出贡献者姓名：**肖春雷

**工作单位：**大连化学物理研究所

**主要科技贡献：**发展了“态-态”分辨的交叉分子束实验装置，为阐明反应散射共振在化学反应中的普遍性问题提供了实验证据

**研究集体主要完成者及工作单位：**

| 姓名  | 工作单位      |
|-----|-----------|
| 杨学明 | 大连化学物理研究所 |
| 戴东旭 | 大连化学物理研究所 |
| 傅碧娜 | 大连化学物理研究所 |
| 刘 舒 | 大连化学物理研究所 |
| 张兆军 | 大连化学物理研究所 |
| 吴国荣 | 大连化学物理研究所 |
| 董文锐 | 大连化学物理研究所 |
| 张未卿 | 大连化学物理研究所 |
| 袁开军 | 大连化学物理研究所 |
| 徐 昕 | 大连化学物理研究所 |
| 江 凌 | 大连化学物理研究所 |
| 谢 华 | 大连化学物理研究所 |
| 陈志超 | 大连化学物理研究所 |
| 贺志刚 | 大连化学物理研究所 |
| 任泽峰 | 大连化学物理研究所 |
| 周传耀 | 大连化学物理研究所 |
| 樊红军 | 大连化学物理研究所 |

附件：个人公示内容模板

## 张东辉 院士

大连化学物理研究所

### 主要科技贡献：

在过去五年中，张东辉院士发展了各种高维量子含时波包理论来描述多原子分子反应动力学和多原子分子与表面相互作用的动力学过程，发展了基于神经网络方法的精确拟合绝热和非绝热势能面的理论计算方法。同时，针对国际前沿反应动力学问题，理论和实验密切结合，做出了一系列原创性的基础学科研究突破，包括阐明了反应散射共振的在化学反应中的普遍性问题，首次揭示了几何相位效应在化学反应中的作用的问题，研究了各种不同振动模式对于化学反应的影响等等。共发表 SCI 收录论文 60 余篇，包括在 Science 和 Nat. Chem. 期刊各发表论文两篇，在 Nat. Comm. 上发表论文三篇等。自 2006 年以来，该团队共在 Science 期刊上发表论文 9 篇。

附件：个人公示内容模板

## 孙志刚 研究员

大连化学物理研究所

### 主要科技贡献：

在过去五年中，孙志刚研究员发展了各种态-态分辨的含时波包理论，克服了长期以来存在于态-态计算中的坐标难题，发展了能够包含几何相位效应的量子波包动力学反应散射理论方法。同时，针对国际前沿反应动力学问题，理论和实验密切结合，做出了一系列原创性的基础学科研究突破，包括阐明了反应散射共振的在化学反应中的普遍性问题，首次揭示了几何相位效应在化学反应中的作用的问题，研究了各种不同振动模式对于化学反应的影响等等。共发表 SCI 收录论文 50 余篇，包括在 *Science* 和 *Nat. Chem.* 期刊各发表论文两篇等。自 2006 年以来，该团队共在 *Science* 期刊上发表论文 6 篇。

附件：个人公示内容模板

## 肖春雷 研究员

中国科学院大连化学物理研究所

### 主要科技贡献：

肖春雷研究员的研究方向是发展和利用交叉分子束散射实验方法，结合新发展的激光技术，对化学反应的微观机理和动力学过程进行研究。近年来，为了揭示反应物分子的振动激发对化学反应的过程的影响，他牵头研制了窄线宽、高脉冲能量、高稳定性的激光系统，发展了高效制备振动激发态氢分子的方法，利用里德堡态标示时间飞渡谱-交叉分子束技术在“态-态”分辨的水平上研究了 H/F/Cl 等自由基和氢分子（及其同位素分子）等基元化学反应的动力学过程，研究了反应共振态、几何相位以及分子取向对化学反应的影响，加深了对化学反应中的动力学共振现象的理解。发表了多篇 SCI 收录的文章，其中包括 Science 文章 5 篇和 Nat. Chem. 文章 1 篇等。