

国家自然科学基金提名书

(2020 年度)

一、项目基本情况

学科评审组:

序号:

编号:

提名者		中国科学院		
项目名称	中文名	激发态动力学与机理研究		
	英文名	Dynamics and mechanism study of excited states		
主要完成人		韩克利, 赵广久, 邓伟侨, 李鹏		
学科分类名称	1	化学动力学	代码	150.3015
	2		代码	
	3		代码	
任务来源		973 计划, 国家自然科学基金		
具体计划、基金的名称和编号: (1). 国家自然科学基金面上项目: 非绝热动力学的理论与实验研究, 20573110; (2). 国家自然科学基金重点项目: 凝聚态复杂分子体系的反应动力学实验与理论研究, 20833008; (3). 973 项目: 多元复杂体系的分子激发态及非绝热动力学研究, 2007CB815202				
已呈交的科技报告编号:				
项目起止时间		起始: 2001 年 1 月 1 日		完成: 2015 年 04 月 22 日

国家科学技术奖励工作办公室制

二、提名意见

(适用于提名机构和部门)

提名者	中国科学院		
通讯地址	北京市西城区三里河路52号404房间发展规划局	邮政编码	100864
联系人	李陞	联系电话	010-68597457
电子邮箱	libi@cashq.ac.cn	传 真	010-68597457
提名意见： <p>该项目以追求化学反应过程的动态本质为目的开展了深入研究，取得了原创性的研究成果。项目结合现代物理化学实验技术与理论方法，研究了复杂体系激发态动力学机理，提出了新的激发态动力学理论计算方法和机理，合理解释了化学动力学过程中的一些重要现象。例如：提出了激发态氢键动力学影响的荧光光谱移动机理，合理解释了溶液中分子间氢键引起的光谱红移或蓝移现象；提出了溶液中激发态电子转移调控的荧光变化机理，揭示了激发态电子转移与溶液中分子荧光变化的关系，开发出更高效的荧光探针分子；提出了非绝热含时量子波包理论方法和非绝热电子跳跃理论方法，分别解决了非绝热过程的精确量子动力学计算问题和 π 堆积体系电荷转移问题。项目发展的高分辨瞬态光谱技术和理论计算方法已被国内外研究机构广泛使用。项目组成员应世界著名出版社 Wiley、Springer、英国皇家化学会、World Scientific 的邀请，主编了 4 部英文学术专著。</p> <p>我单位认真审阅了该项目提名书及附件材料，确认全部材料真实有效，相关栏目均符合国家科学技术奖励的填写要求。按照要求，完成人所在单位已对该项目的拟提名情况进行了公示，公示无异议。</p> <p>提名该项目为国家自然科学奖 <u>二</u> 等奖。</p> <p>声明： 本单位遵守《国家科学技术奖励条例》及其实施细则的有关规定，承诺遵守评审工作纪律，所提供的提名材料真实有效，且不存在任何违反《中华人民共和国保守国家秘密法》和《科学技术保密规定》等相关法律法规及侵犯他人知识产权的情形。如产生争议，将积极调查处理。如有材料虚假或违纪行为，愿意承担相应责任并按规定接受处理。</p>			
法人代表签名：		单位（盖章）	
年 月 日		年 月 日	

三、项目简介

该项目属于物理化学学科化学动力学研究领域。化学动力学是研究化学反应本质的一门学科,而激发态动力学过程由于其超快的时间尺度和所涉及的复杂的电子态问题,导致了激发态动力学与机理研究一直是化学动力学研究的热点和难点。

项目利用现代物理化学技术与理论,特别是将自主研发的瞬态光谱实验技术和理论计算紧密结合、相互验证,从而克服了激发态动力学研究中的困难。项目聚焦于溶液相中氢键对分子荧光的影响、氧化还原生物探针分子、非绝热动力学等多个具有代表性的分子体系,研究了激发态参与的氢键动力学,荧光传感动力学、非绝热动力学等重要化学动力学行为,提出和发展了一些激发态动力学机理和理论计算方法,并把这些动力学机理和方法用于研究多种相关的物理化学现象,从而进一步指导实验研究。主要科学发现有:

1. 提出了激发态氢键动力学影响的荧光光谱移动机理:发现了激发态氢键动力学根源于体系的激发态非绝热过程导致的电荷再分布及其所诱发的溶液和溶质分子体系的重构;阐明了溶质分子处于激发态时氢键对分子间电荷转移过程的调控机制;揭示了溶质分子处于激发态时氢键与荧光光谱移动之间的内在规律。

2. 提出了激发态电子转移调控的荧光变化机理:阐明了体系荧光变化根源于激发态不同非绝热通道的竞争机制;揭示了激发态电子转移与溶液中分子荧光变化的关系;利用项目提出的机理,设计开发了一系列氧化还原荧光探针,并实现了细胞和动物活体的可逆检测。

3. 发展了非绝热含时量子波包理论计算方法和非绝热电子跳跃理论计算方法,成功地将非绝热含时量子波包理论计算方法应用到非绝热体系的精确量子动力学计算,同时将非绝热电子跳跃理论方法应用到 π 堆积体系的研究中。

研究成果主要发表在 *J. Am. Chem. Soc.*、*Nature Protoc.*、*Acc. Chem. Res.*、*Phy. Rev. Lett.* 等杂志上。8 篇代表性论文他引共 2951 次。引用杂志包括 *Chem. Soc. Rev.*、*Acc. Chem. Res.* 等。项目自主研发的瞬态光谱等实验技术和编写的理论计算软件,获得了 8 项授权发明专利、16 项计算机软件著作权,并对这些知识产权进行了转移转化。

基于项目研究成果的影响,应世界著名出版社 Wiley、Springer、英国皇家化学会 (RSC)、World Scientific 的邀请,主编了《*Hydrogen Bonding and Transfer in the Excited State*》等 4 部英文学术专著。作为 Guest Editor,主编 PCCP 激发态氢键动力学主题专刊 1 期和 JPC 理论与高性能计算化学国际会议专辑 1 期。第一完成人入选 2015 年度“Thomson Reuters”和 2016、2018 年度“Clarivate Analytics”全球高被引用科学家名录。项目执行期间 1 人获得国家杰出青年基金项目资助、1 人获得国家优秀青年基金项目资助。阶段性成果曾获辽宁省自然科学奖一等奖。

六、代表性论文（专著）目录（不超过 8 篇）

序号	论文（专著） 名称/刊名 /作者	年卷页 码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	发表 时间 (年 月 日)	通讯 作者 (含 共同)	第一 作者 (含 共同)	国内作 者	他引总 次数	检索数 据库	论文署 名单位 是否包 含国外 单位
1	Hydrogen Bonding in the Electronic Excited State/Accounts of Chemical Research/ 赵广久、韩克利	2012 年 45 卷 404 页	2012 年 3 月 1 日	KE-LI HAN	GUAN G-JIU ZHAO	赵广 久, 韩 克利	723	WOS 平 台所有 数据库	否
2	Early time hydrogen-bonding dynamics of photoexcited coumarin 102 in hydrogen-donating solvents: Theoretical study/ Journal of Physical Chemistry A/赵广久、韩克利	2007 年 111 卷 2469 页	2008 年 03 月 09 日	Ke-Li Han	Guang -Jiu Zhao	赵广 久, 韩 克利	425	WOS 平 台所有 数据库	否
3	Site-selective photoinduced electron transfer from alcoholic solvents to the chromophore facilitated by hydrogen bonding: A new fluorescence quenching mechanism/ Journal of Physical Chemistry B/赵广久、刘建勇、周立川、韩克利	2007 年 111 卷 8940 页	2007 年 08 月 02 日	Ke-Li Han	Guang -Jiu Zhao	赵广 久、刘 建勇、 周立 川、韩 克利	522	WOS 平 台所有 数据库	否

4	A Near-IR Reversible Fluorescent Probe Modulated by Selenium for Monitoring Peroxynitrite and Imaging in Living Cells/Journal of the American Chemical Society/ 于法标、李鹏、李光跃、赵广久、楚天舒、韩克利	2011 年 133 卷 11030 页	2011 年 6 月 27 日	Keli Han	Fabiao Yu, Peng Li	于法标、李鹏、李光跃、赵广久、楚天舒、韩克利	344	WOS 平台所有数据库	否
5	Reversible Near-Infrared Fluorescent Probe Introducing Tellurium to Mimetic Glutathione Peroxidase for Monitoring the Redox Cycles between Peroxynitrite and Glutathione in Vivo/ Journal of the American Chemical Society/ 于法标、李鹏、王炳帅、韩克利	2013 年 135 卷 7674 页	2013 年 4 月 27 日	Keli Han	Fabiao Yu	于法标、李鹏、王炳帅、韩克利	318	WOS 平台所有数据库	否
6	Redox-Responsive Fluorescent Probes with Different Design Strategies/ Accounts of Chemical Research/ 楼张蓉、李鹏、韩克利	2015 年 48 卷 1358 页	2015 年 4 月 22 日	Keli Han	Zhangrong Lou	楼张蓉、李鹏、韩克利	230	WOS 平台所有数据库	否

7	Correlation quantum dynamics between an electron and D_2^+ molecule with attosecond resolution/Physical Review Letters/ 胡杰、韩克利、何国钟	2005 年 95 卷 123001 页	2005 年 09 月 15 日	Ke-Li Han	Jie Hu	胡杰、韩克利、何国钟	307	WOS 平台所有数据库	否
8	Quantitative prediction of charge mobilities of p-stacked systems by first-principles simulation/NATURE PROTOCOLS/ 邓伟侨、孙磊、黄金斗、柴硕、温书豪、韩克利	2015 年 10 卷 632 页	2015 年 03 月 26 日	Ke-Li Han	Wei-Qiao Deng, Lei Sun	邓伟侨、孙磊、黄金斗、柴硕、温书豪、韩克利	82	WOS 平台所有数据库	否
合 计							2951		

补充说明（视情填写）：

承诺：①本项目所列知识产权符合提名要求且无争议。②已明确告知上述论文（专著）所有作者：所列论文（专著）用于提名 2020 年国家自然科学奖；项目如获奖后所列论文（专著）不得再次参评，如未获奖所列论文（专著）再次参评须间隔一年。③未列入项目主要完成人的第一作者、通讯作者（含共同第一作者、共同通讯作者）已出具知情同意书面签字意见，与其他作者的有关知情证明材料均存档备查。④如因上述事项引发争议，将积极配合调查处理并承担相应责任。

第一完成人签名：

八、主要完成人情况表

姓 名	韩克利	性 别	男	排 名	1	国 籍	中国
出生年月		出 生 地	山东省		民 族	汉族	
身份证号		归国人员	是		归国时间		
技术职称	研究员		最高学历	研究生		最高学位	博士
毕业学校	中国科学院大连化学物理研究所		毕业时间		所学专业	物理化学	
电子邮箱		办公电话			移动电话		
通讯地址	辽宁省大连市中山路 457 号				邮政编码	116023	
工作单位	中国科学院大连化学物理研究所				行政职务	无	
二级单位	分子反应动力学国家重点实验室				党 派	中国民主同盟	
完成单位	中国科学院大连化学物理研究所				所 在 地	辽宁	
					单位性质	公益性研究单位	
参加本项目的起止时间		自 2001 年 01 月 01 日至 2015 年 04 月 22 日					
<p>对本项目重要科学发现的贡献：</p> <p>项目负责人。是科学发现 1、2、3 的主要完成人，是代表性论文 1-8 的通讯作者。设计了本项目的总体思路和方案，组织实施了本项目的研究工作，研究了复杂体系激发态动力学的理论与机理，提出了激发态氢键动力学影响的荧光光谱移动机理，提出了激发态电子转移调控的荧光变化机理，发展了非绝热含时量子波包理论方法和非绝热电子跳跃理论方法。</p>							
<p>曾获国家科学技术奖情况：</p> <p>无</p>							
<p>声明：本人同意完成人排名，自觉遵守《国家科学技术奖励条例》及其实施细则的有关规定，遵守评审工作纪律，保证所提供的有关材料真实有效，且不存在违反相关法律法规及侵犯他人知识产权的情形。该项目是本人本年度被提名的唯一项目。本人工作单位已知悉本人被提名情况且无异议。如产生争议，将积极配合调查处理工作。如有材料虚假或违纪行为，愿意承担相应责任并按规定接受处理。</p> <p style="text-align: center;">本人签名：</p> <p style="text-align: center;">年 月 日</p>				<p>完成单位声明：本单位确认该完成人情况表内容真实有效，且不存在违反相关法律法规及侵犯他人知识产权的情形。如产生争议，将积极配合调查处理。</p> <p>工作单位声明：本单位对该完成人被提名无异议。</p> <p style="text-align: center;">单位（盖章）</p> <p style="text-align: center;">年 月 日</p>			

姓名	赵广久	性别	男	排名	2	国籍	中国
出生年月		出生地	河北省		民族	汉族	
身份证号		归国人员	否		归国时间		
技术职称	教授		最高学历	研究生	最高学位	博士	
毕业学校	中国科学院大连化学物理研究所		毕业时间		所学专业	物理化学	
电子邮箱		办公电话			移动电话		
通讯地址	天津市津南区海河教育园区雅观路 135 号天津大学北洋园校				邮政编码	300354	
工作单位	天津大学				行政职务	无	
二级单位	理学院化学系天津市分子光电科学重点实验室				党派	群众	
完成单位	中国科学院大连化学物理研究所				所在地	辽宁	
					单位性质	公益性研究单位	
参加本项目的起止时间	自 2005 年 01 月 01 日至 2015 年 01 月 01 日						
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>项目参加人，对重要科学发现 1、2 有贡献，是代表性论文 1-3 第一作者。设计开展了飞秒时间分辨的超快光谱动力学实验，结合精确的激发态量子化学计算及动力学模拟，较系统地研究了凝聚相中一些复杂分子体系形成的电子激发态氢键复合物的非绝热动力学。发现电子激发态氢键快速加强现象，提出激发态分子间氢键加强促使光诱导电子转移的荧光变化普遍机理，</p>							
<p>曾获国家科技奖励情况：</p> <p>无</p>							
<p>声明：本人同意完成人排名，遵守《国家科学技术奖励条例》及其实施细则的有关规定，承诺遵守评审工作纪律，保证所提供的有关材料真实有效，且不存在任何违反《中华人民共和国保守国家秘密法》和《科学技术保密规定》等相关法律法规及侵犯他人知识产权的情形。该项目是本人本年度被推荐的唯一项目。如有材料虚假或违纪行为，愿意承担相应责任并接受相应处理。如产生争议，保证积极配合调查处理工作。</p> <p>本人签名：</p> <p>年 月 日</p>				<p>完成单位声明：本单位确认该完成人情况表内容真实有效，且不存在任何违反《中华人民共和国保守国家秘密法》和《科学技术保密规定》等相关法律法规及侵犯他人知识产权的情形。如产生争议，愿意积极配合调查处理工作。</p> <p>工作单位声明：本单位对该完成人被推荐无异议。</p> <p>单位（盖章）</p> <p>年 月 日</p>			

姓名	邓伟侨	性别	男	排名	3	国籍	中国
出生年月		出生地	湖北省	民族	汉族		
身份证号		归国人员	是	归国时间			
技术职称	教授	最高学历	研究生	最高学位	博士		
毕业学校	美国加州理工学院	毕业时间		所学专业	物理化学		
电子邮箱		办公电话		移动电话			
通讯地址	山东省青岛市滨海路 72 号			邮政编码	266237		
工作单位	山东大学			行政职务	无		
二级单位	前沿交叉科学青岛研究院			党派	群众		
完成单位	中国科学院大连化学物理研究所			所在地	辽宁		
				单位性质	公益性研究单位		
参加本项目的起止时间	自 2009 年 08 月 01 日至 2015 年 12 月 31 日						
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>项目参加人，对科学发现 3 有贡献，是代表性论文 8 的第一作者。发展了非绝热动力学理论方法，并应用到研究 π 堆积体系的电荷转移性质。</p>							
<p>曾获国家科技奖励情况：</p> <p>无</p>							
<p>声明：本人同意完成人排名, 遵守《国家科学技术奖励条例》及其实施细则的有关规定，承诺遵守评审工作纪律，保证所提供的有关材料真实有效，且不存在任何违反《中华人民共和国保守国家秘密法》和《科学技术保密规定》等相关法律法规及侵犯他人知识产权的情形。该项目是本人本年度被推荐的唯一项目。如有材料虚假或违纪行为，愿意承担相应责任并接受相应处理。如产生争议，保证积极配合调查处理工作。</p>				<p>完成单位声明：本单位确认该完成人情况表内容真实有效，且不存在任何违反《中华人民共和国保守国家秘密法》和《科学技术保密规定》等相关法律法规及侵犯他人知识产权的情形。如产生争议，愿意积极配合调查处理工作。</p>			
<p>本人签名：</p>				<p>单位（盖章）</p>			
<p>年 月 日</p>				<p>年 月 日</p>			

姓 名	李鹏	性别	男	排 名	4	国 籍	中国
出生年月		出生地	山东省	民 族	汉族		
身份证号		归国人员	否	归国时间			
技术职称	研究员	最高学历	研究生	最高学位	博士		
毕业学校	中国科学院大连化学物理研究所	毕业时间		所学专业	有机化学		
电子邮箱		办公电话		移动电话			
通讯地址	山东省青岛市滨海路 72 号			邮政编码	266237		
工作单位	山东大学			行政职务	无		
二级单位	前沿交叉青岛研究院			党 派	群众		
完成单位	中国科学院大连化学物理研究所			所 在 地	辽宁		
				单位性质	公益性研究单位		
参加本项目的起止时间		自 2009 年 09 月 05 日至 2015 年 01 月 01 日					
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>项目参加人，对重要科学发现 2 有贡献，是代表性论文 4 的共同第一作者和代表性论文 5 和 6 的第二作者。发展了一种利用氧化还原刺激调控荧光变化的方法，并应用于细胞氧化还原状态变化的荧光成像研究。</p>							
<p>曾获国家科技奖励情况：</p> <p>无</p>							
<p>声明：本人同意完成人排名，遵守《国家科学技术奖励条例》及其实施细则的有关规定，承诺遵守评审工作纪律，保证所提供的有关材料真实有效，且不存在任何违反《中华人民共和国保守国家秘密法》和《科学技术保密规定》等相关法律法规及侵犯他人知识产权的情形。该项目是本人本年度被推荐的唯一项目。如有材料虚假或违纪行为，愿意承担相应责任并接受相应处理。如产生争议，保证积极配合调查处理工作。</p>				<p>完成单位声明：本单位确认该完成人情况表内容真实有效，且不存在任何违反《中华人民共和国保守国家秘密法》和《科学技术保密规定》等相关法律法规及侵犯他人知识产权的情形。如产生争议，愿意积极配合调查处理工作。</p>			
<p>本人签名：</p>				<p>单位（盖章）</p>			
<p>年 月 日</p>				<p>年 月 日</p>			