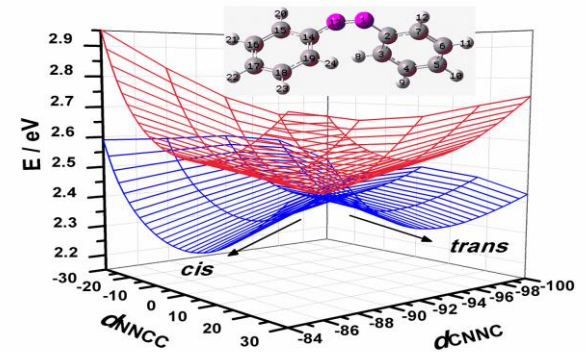
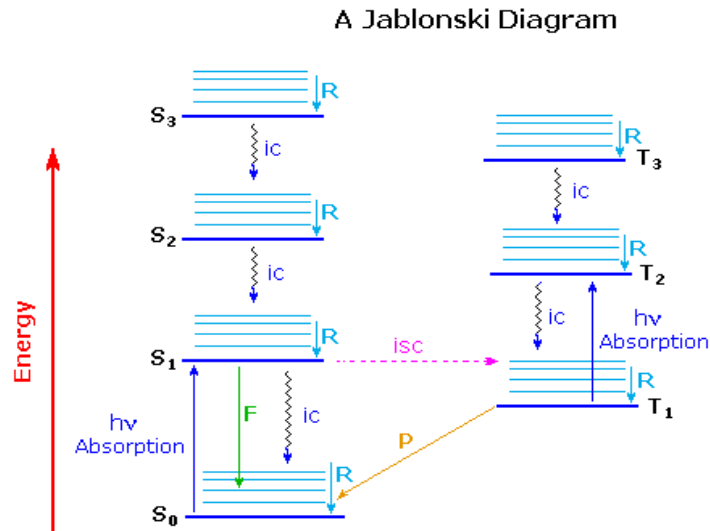


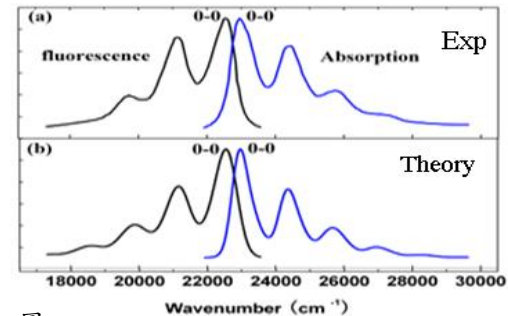
朱超原教授 / 應用化學系

分動力學子&光譜、計算&理論化學、光化學、電子激發態勢能面

本實驗室為跨計算&理論化學研究室，研究與特色 (如:圖一和圖二):分子吸收光子後各種光物理化學過程可用Jablonski圖表示。當分子得到能量後，可能激發到各種S和T態，到S態的電子多於到T態的電子。激發態電子能量衰減有多種方式。本實驗室充分利用計算&理論化學方法來模擬光化學過程。(1)我們已經推導出非絕熱躍遷幾率的簡單解析公式，對於二苯乙烯(圖一)和類似更大的分子體系的光致順反異構化反應的分子反應動力學。我們已經到達能處理生物分子和材料分子相關的非絕熱動力學過程階段。(2)我們已經發展了analytical 非簡諧Franck-Condon 公式能應用到模擬分子吸收光譜、熒光光譜和分子內部轉化率。我們研究溶劑效應、表面效應對模擬綠色熒光蛋白生物分子光譜(圖二)，模染料敏化分子在二氧化鈦表面上的光譜和電子轉移速率影響。



圖一



圖二