

陈藤藤——未来三年研究计划

研究目标

申请人的课题组希望借助本项目，进一步开展气相与凝聚相分子和化学反应在振动强耦合下的超快动力学实验研究，以取得该前沿基础研究领域的国际领先优势。申请人于2023年8月在香港科技大学化学系入职助理教授、博士生导师后，建立独立团队，搭建超快泵浦探测激光和二维红外光谱实验平台，旨在解决领域内的前沿问题和重要难题，有利于我国追赶该领域的国际前沿，填补我国相关领域的研究空白，增强我国在该领域的话语权和领导力。同时深入探索对这一新技术的在生产生活上的潜在应用，注重科研到相关产业的商业转化。

研究背景

研究气相和凝聚相分子在光-物质强相互作用下的动力学性质具有重要的意义。首先，这种研究可以深入了解分子在强光场下的行为，探究光与物质相互作用的机制。其次，这种研究可以为光电器件、光催化和光化学反应等领域的应用提供理论基础和实验指导。最后，这种研究还可以为分子动力学研究提供新的思路和方法。

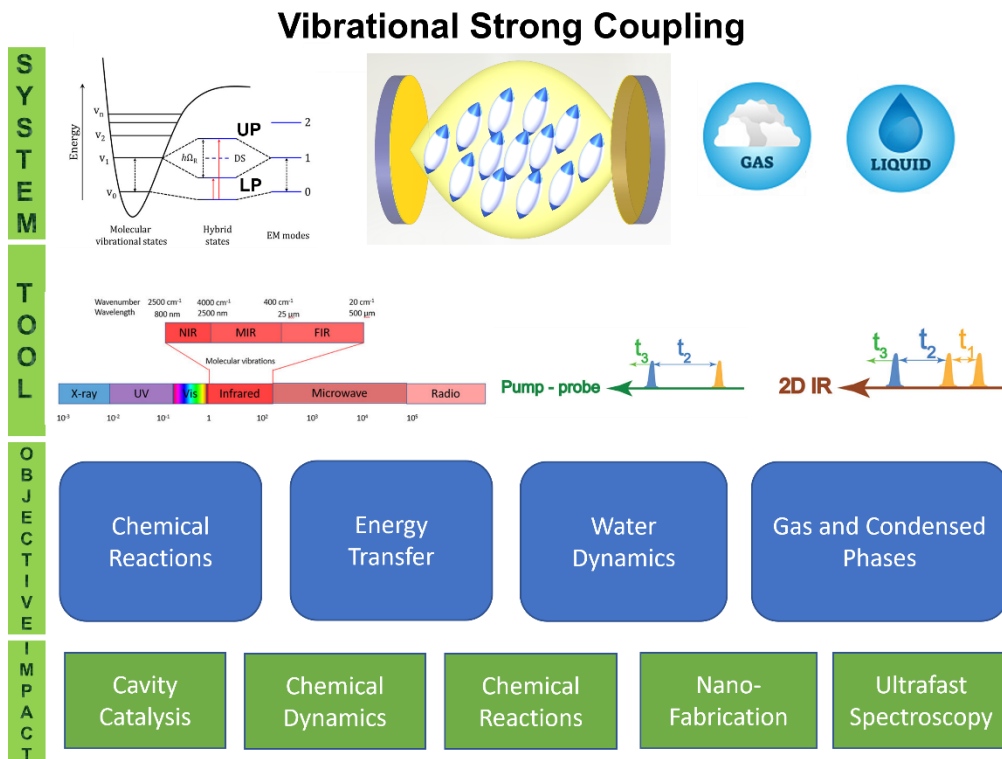
然而，研究气相和凝聚相分子在光-物质强相互作用下的动力学性质也存在着一些挑战和难题。其中，最主要的挑战是如何在实验中获得高分辨率、高精度的数据。由于强光场下分子的动力学行为非常复杂，需要使用高分辨率的实验技术，如超快光谱学、光电电子能谱等，来获取分子的动力学信息。此外，还需要对实验数据进行精确的处理和分析，以获得可靠的结果。另一个挑战是如何解决分子间相互作用的影响。在气相中，分子间的相互作用很弱，且气相分子的浓度较低，不太容易形成很强的光-物质相互作用，但在凝聚相中，分子间的相互作用很强，这会对分子的动力学行为产生影响。因此，需要开发新的理论模型和实验方法，以考虑分子间相互作用的影响。最后，还需要解决如何控制和调节光-物质相互作用的挑战。在实验中，需要使用高功率的激光来激发分子，但这可能会导致分子的损伤和破坏，也会对实验的光学空腔造成损伤。因此，需要开发新的实验方法和技术，以控制和调节光-物质相互作用的强度和持续时间，从而保护分子的完整性和稳定性。

申请人在前期研究工作的基础上，积累了丰富的气相金属团簇几何构型和电子结构、液相分子复杂超快动力学研究经验。申请人拟将对更复杂体系开展超快化学动力学研究，例如气相和液相分子在振动强耦合下的能量传输、化学交换、化学反应机理等一系列超快过程的动力学性质的相关研究。申请人的目标是揭示光-物质强相互作用特别是振动强耦合这一新领域内的新奇现象背后的动力学机理和化学反应机制，并建立相关化学理论解释。

研究内容

申请人将具体开展以下两个方向的研究：

- ①利用微纳加工制造新型光纤光学空腔，实现气相分子的振动强耦合，研究气相分子化学反应在振动强耦合下的化学反应速率变化与反应规律；
- ②通过时间分辨泵浦探测光谱和二维红外光谱研究液相分子在振动强耦合情况下如能量传输，水分子氢键，化学交换等超快过程的动力学性质。



预期成果

该项目的预期成果包括：

- 搭建新一代时间分辨泵浦探测和二维红外超快光谱实验平台；
- 制造基于光纤的微型增强光场强度的光学空腔，实现气相分子的振动强耦合，研究气相与液相分子的化学反应机理及反应动力学的规律；
- 深入了解分子在振动强耦合下的影响因素，实现利用分子振动极化基元对溶液内分子能量传输的定向控制；
- 研究振动强耦合是否会影响溶液内氢键形成和化学交换的动力学过程；
- 组建科研团队，培养学生的科学意识，支持并鼓励学生参加国内外学术会议，介绍相关研究成果，在领域内有广泛影响力。

该项目研究的成果将发表 1-2 篇论文在顶级期刊(如 PNAS, Sci. Adv., Nat. Commun.)上。如果振动强耦合可以改变溶液内氢键形成和化学交换的动力学过程，成果将发表在 Science 上。即使是失败的实验，由于该问题是热点问题，也可以发表在顶级期刊如 PNAS 上。