



## 理论室第15期学术报告



**报告题目：有机聚集体中载流子动力学的理论与应用**

**报告人：赵仪 教授，厦门大学**

**报告时间：2023年4月23日（星期日）上午 11:00**

**报告地点：南楼二层会议室**

**邀请人：高兴发 研究员**

### 摘要：

在有机材料中，由于较强的电-声相互作用，使得载流子通常遵循跳跃运动，而在无机材料中，周期性结构形成的能带导致载流子满足波的运动。人们同时也发现，在有机晶体或聚集体中，载流子运动既有跳跃运动又有波运动的性质，由于理论方法的缺失，使得描述这类运动面临巨大挑战。针对这一问题，我们发展了一种严格的随机薛定谔方程和它的几个近似方程，可用于描述具有纳米尺度有机聚集体中载流子的动力学过程【1】；同时也提出了如何把电子结构计算和这些动力学方法相结合的策略【2】，来用于揭示真实有机分子聚集体中的动力学行为，如聚集体光谱、激子能量弛豫、单线态裂分等。

### 报告人简介：

赵仪，厦门大学化学化工学院，卢嘉锡特聘教授。1997年在中科院大连化物所和香港科技大学获博士学位后，先后在德国柏林自由大学、美国伊利诺州立大学香槟分校和加州大学伯克利分校进行博士后研究工作，2003年任中国科学技术大学教授，2005年访问日本分子科学研究所，2008年任厦门大学特聘教授。一直从事于理论化学动力学研究工作。研究内容涉及到绝热、非绝热化学反应速率理论，电荷、能量转移速率理论，分子线性、非线性光谱，多原子分子飞秒动力学等领域。所发展的原创性方法包括，研究化学反应的“量子瞬子理论”、描述电子转移的“非绝热过渡态理论”、刻画有机材料载流子运动的“随机薛定谔方程”等，一些发展的方法也得到了国际同行广泛关注并加以应用。近几年的学术活动主要包括，作为大会主席在2019年成功主持召开了‘复杂分子体系激发态和动力学理论’的国际研讨会；作为分会主席之一，代表中国化学会成功申办到Pacifichem2020的分会；目前为中国化学会超快光谱专业委员会委员和分子反应动力学专业委员会委员。