



学术报告



State Key Laboratory
of Chemical Resource Engineering

Thermo- and Photo-induced Electron Transfer in Bridged Mo_2 Dimers and Charge Transport of Rh_2 Oligomers in the Molecular Junctions

报告人：刘春元 教授（暨南大学化学系主任）

时间：2018-5-11（周五）上午 10:00

地点：教学楼420



报告摘要：

刘春元教授课题组基于共价键合双钼配位单元合成了多系列 $[\text{Mo}_2]$ -bridge- $[\text{Mo}_2]$ 化合物作为电子耦合和电子转移研究Donor-Bridge-Acceptor实验模型。利用 Mo_2 中心特殊的电子构型，在双态模型理论框架下，系统研究了D-B-A体系电子耦合矩阵元（ H_{ab} ）和电子转移动力学参数（ ΔG^* 和 k_{et} ），以及电子给、受体，桥基长度、构象、对称性和氢键等因素对电子耦合和转移的影响；在此基础上，全面验证了McConnell电子自交换机理，Marcus电子转移理论以及Hush和CNS电子偶合理论。系统研究了Robin-Day Class I、Class II 和Class III混价化合物及过渡态的谱学特征，通过实验和理论分析，提出了极强电子耦合Class IV类的定义。在光诱导电子转移方向，发现了受距离、电子耦合程度和桥基共轭性影响很小的非绝热电子迁移现象，由此提出了量子不相干电子转移科学问题。在分子电子学领域对 Rh_2 -有机杂化分子导线的研究，观察到随分子导线的延长，电荷传导机理从超交换隧穿（Tunneling）过渡到连续跳跃(Hopping)，并发现弱耦合体系具有更好的长程电荷传导能力。这一实验结果改变了常规的电子耦合促进电子转移的认识，有助于分子导线的设计合成。此外，研究了D-B-A偶极分子的导电性行为，发现了D/A氧化还原不对称性对分子整流效应和方向的相关性。这些研究在*J. Am. Chem. Soc.*, *Chem. Sci.*, *Chem. Commun.*, *Chem. Eur. J.*, *Inorg. Chem.*, *J. Phys. Chem. C*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *Dalton Trans.*等化学主流期刊发表论文50余篇。