



北京理工大学  
Beijing Institute of Technology

## “21世纪学科前沿”系列学术报告

### Theoretical description of nonadiabatic dynamics

报告人：兰峥岗 研究员，中科院青岛生物能源与过程研究所

时间：2016年12月15日 15:30

地点：北京理工大学良乡校区生态楼118

#### 报告摘要：

近年来，本课题组发展了处理非绝热动力学的程序包JADE，采用面跳跃的方法，支持TDDFT, CIS, TDHF, ADC2, RICC2 和 CASSCF等多种处理电子结构的方法，研究了一系列重要的光诱导的能量转移过程和反应机理。此外，我们还将量子动力学与电子结构从头算方法结合，成功模拟了有机光伏体系中的非绝热过程。

#### 报告人简介：

中国科学院“百人计划”研究员（2011年入选），博士生导师。2007年5月在德国慕尼黑工业大学获得理论化学博士学位（博士论文满分）。2007年6月-2009年6月先后在慕尼黑工业大学和马普碳化学研究所从事博士后研究。2009年7月-2011年4月作为研究科学家在马普碳化学研究所继续研究工作。2011年回国并入选中科院“百人计划”。已经在PNAS, Angew. Chem. Int. Ed., J. Phys. Chem. Lett. 等杂志上发表论文近百篇。

主办：研究生院

3

承办：化学与化工学院