



## “对时间依赖密度泛函理论开发与应用”项目通过验收

文章来源: 福建物质结构研究所

发布时间: 2011-04-29

【字号: 小 中 大】

4月28日,受科技部委托,福建省科技厅组织专家对中科院福建物质结构研究所吴克琛研究员负责承担的国际科技合作专项项目“对时间依赖密度泛函理论开发与应用”进行了验收。专家组审阅了项目有关材料,听取了项目组的汇报,一致同意项目通过验收。

该项目针对新的时间依赖的密度泛函理论方法、有机金属化合物微观结构与非线性光学性质之间的关系和有机金属簇配合物的光学性能等关键科学问题开展研究,取得了系列研究成果:(1)时间依赖的密度泛函理论的拓展:提出了一个有效计算含过渡金属体系非线性光学性质的密度泛函杂化交换相关势函数;发展了基于多体理论的对时间依赖的密度泛函理论新方法,有效应用于有机金属及过渡金属簇合物非线性光学性质的计算和科学分析;(2)有机金属化合物结构性能关系的研究:应用发展的对时间依赖的密度泛函理论技术,系统地研究有机金属及过渡金属簇合物的非线性光学特性和低位电子激发态性质,揭示了微观结构与非线性光学性质的科学规律;(3)有机金属非线性光学材料的合成:制备研究了一批新颖的有机金属配聚合物及其红外倍频光学性质,为展开微观结构调控和新材料设计开发奠定了重要的基础。相关研究成果在国内外学术刊物上发表SCI收录论文31篇,申请国家发明专利3件,获授权专利2件,撰写英文专著1篇(章节)。

通过项目的实施,项目组与荷兰材料科学中心合作方开展了实质性的合作研究,合作双方在人才培养和学术交流等方面取得了重要进展,促进了双方的科技交流和合作。

打印本页

关闭本页