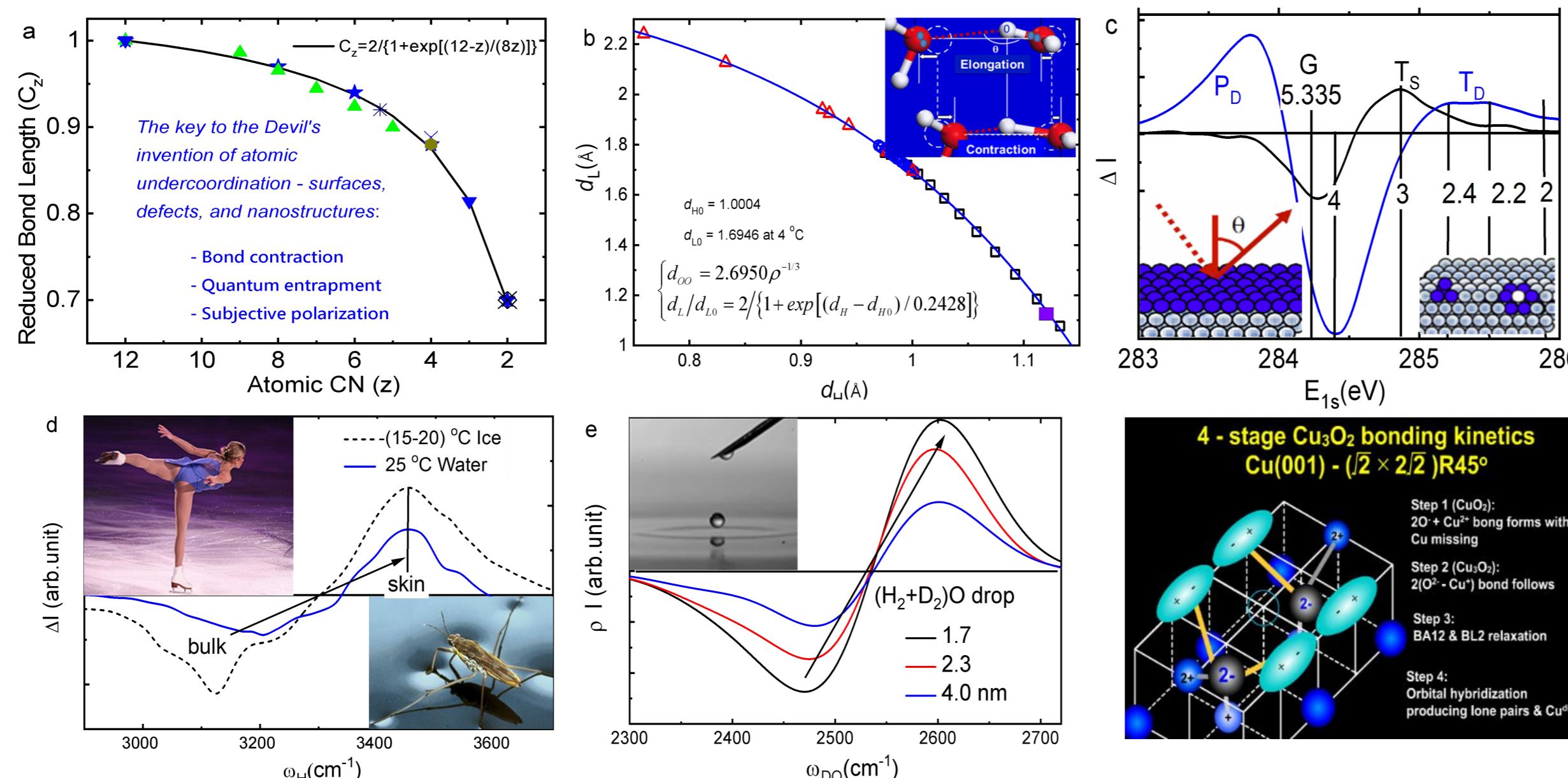




方向简介及主要成果

● 对主导物质内禀行为的哈密顿量施加外场微扰，结合计量谱学、理论计算和其他观测手段探索配位键与电子在时空频域的动力学行为，揭示外场-势/键-电子-物性的关联和演变规律：

- 表面、缺陷与纳米结构端态键弛豫与电子极化
- 先进功能材料设计与加工
- 耦合氢键与冰水、溶液、炸药和分子晶体
- 异质界面、碳氮氧氢吸附与催化反应



a局域键长随原子配位数变化和b耦合氢键(O:H-O)分段长度受激协同弛豫的标度关系; c石墨表面单原子层和电缺陷分辨电子谱; d冰水和e纳米水滴表皮共享超固态声子谱; f氧化反应四步成键动力学的超低能电子衍射结构解析。

代表性成果:

专著

- C.Q. Sun, *Electron and Phonon Spectrometrics*. 2020: Springer Nature. 541p (中文版: 科学出版社 2021)
- C.Q. Sun, *Solvation Dynamics: A Notion of Charge Injection*. 2019: Springer Nature. 326 p (中文版: 高教出版社 2022)
- C.Q. Sun, Y. Sun, *The Attribute of Water: Single Notion, Multiple Myths*. 2016: Springer-Verlag. 525p (中文版: 高教出版社 2019)
- C.Q. Sun, *Relaxation of the Chemical Bond*. 2014: Springer-Verlag. 839 p (中文版: 高教出版社 2017)

专述

- C.Q. Sun, Y. Huang *The Physics of Water Irregularity*. Physics Reports, (在审)
- X. Yang, C. Peng, L. Li, M. Bo, Y. Sun, Y. Huang, C.Q. Sun, *Multifield-resolved phonon spectrometrics: structured crystals and liquids*. Prog Solid State Chem, 2019. **55**: 20-66.
- C.Q. Sun, *Aqueous charge injection: solvation bonding dynamics, molecular nonbond interactions, and extraordinary solute capabilities*. Int Rev Phys Chem, 2018. **37**: 363-558.
- X.J. Liu, X. Zhang, M.L. Bo, L. Li, Y.G. Nie, H. Tian, Y. Sun, S. Xu, Y. Wang, W. Zheng, C.Q. Sun, *Coordination-resolved electron spectrometrics*. Chem Rev, 2015. **115**: 6746-6810.
- C.Q. Sun, *Size dependence of nanostructures: Impact of bond order deficiency*. Prog Solid State Chem, 2007. **35**: 1-159.
- C.Q. Sun, *Oxidation electronics: bond-band-barrier correlation and its applications*. Prog Mater Sci, 2003. **48**: 521-685.

研究基础及主要成员

- 发展了键合-能带-势场关联、多场激发键弛豫、氢键耦合振子对以及水合反应电荷注入等理论。
- 建立了键长对原子配位数的依赖和耦合氢键分段协同弛豫等两个定量标度关系。
- 发现了低配位原子键收缩、氧化四步反应动力学、三体耦合氢键协同性、反氢键、超氢键、水的温致准固态、极化超固态等。
- 拥有一系列电子声子计量谱学发明专利。
- 著有双语《键合弛豫》《氢键规则》《水合反应》《计量谱学》，30余篇专述和近500篇学术论文。

团队指导：王彪 教授

团队成员：孙长庆 教授

负责人：孙长庆(cqsun@dgut.edu.cn)