

## 許昭萍 副研究員 (中央研究院化學研究所)

### 代表作名稱：

1. Lin, B. C., Cheng, C. P.\*, You, Z.-Q., Hsu, C.-P.\*, "Charge Transport Properties of Tris(8-hydroxyquinolino)aluminum(III): Why It Is an Electron Transporter", *J. Am. Chem. Soc.*(2005), volume 127, pp. 66-67
2. Chen, H.-C. , You, Z.-Q., Hsu, C.-P.\*, "The mediated excitation energy transfer: Effects of bridge polarizability", *J. Chem. Phys.*(2008), Volume 129, 084708
3. You Z.-Q., Hsu C.-P., Fleming G.-R., "Triplet-triplet energy-transfer coupling: Theory and calculation", *J. Chem. Phys. (also selected for the Feb. 6, 2006 issue of Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology.)*(2006), volume 124, 044506

### 得獎簡評：

許昭萍副研究員在量子化學計算中使用 difference density 直接得到分子間或分子內之電子耦合值，對困難的電子耦合問題提出一重要且非常聰明之解決方法。此方法經仔細測試證明確實有效，可應用在任何 donor-acceptor 之系統，使我們對能量轉移的瞭解邁出一大步，因此在學術上具有突破和貢獻。許博士所提出的三篇論文，均可堪稱為在電子轉移和能量轉移領域中 “state-of-art” 之作。兩篇 JCP 的論文中，一篇詳細描述如何處理並解決在三重態能量轉移上所遇到之困難問題，顯示作者能充分駕馭其專業的能力。她的解決方法雖然在觀念上很簡單，但在這之前卻無人曾想到。不難預料，此方法將對量子化學造成很大的衝擊，甚至將在日後成為一種標準的計算方式。另一篇 JCP 論文探討橋接分子在能量轉移中所扮演的角色，首度提出橋接分子的極化率 (polarizability) 才是對能量轉移發生影響的主因，比傳統上以能階差來解釋更加直觀且易於應用。第三篇 JACS 的論文則是應用在了解並推測 OLED 常用分子 Tris(8-hydroxyquinolino)aluminum(III) 之電荷傳輸特性中電子轉移遠快於電洞轉移之原因。許昭萍副研究員無疑在量子化學研究中表現出色，獲獎可謂實至名歸。