



姓名：梅亞歷

學歷：

Kurnakov's Institute of General and Inorganic
Chemistry, Physical Chemistry, Ph.D.

Moscow Institute of Steel and Alloys, Physical
Chemistry, B. Sc

經歷：

中央研究院，原子與分子科學研究所，博士後研究
(1996/01-1998/06)

中央研究院，原子與分子科學研究所，助理研究員
(1998/07-2001/09)

中央研究院，原子與分子科學研究所，副研究員
(2001/10- 迄今)



著作名稱：

1. Mebel A.M., Hayashi M., Liang K.K., Lin S.H. Ab initio calculations of vibronic spectra and dynamics for small polyatomic molecules: The role of Dushinsky Effect. *J. Phys. Chem. A*, 1999, 103, 10674-10690.
2. Mebel A.M., Kaiser R.I., Lee Y.T. Ab initio MO study of the global potential energy surface of C₃H₄ in triplet electronic state and the reactions of C (3P_j) with C₃H₄ (allene and propyne) and C₂ (a₃ Pu) with C₂H₄(X1A_{1g} +). *J. Am. Chem. Soc.*, 2000, 122, 1776-1788.
3. Mebel A.M., Lin M.C., Chakraborty D., Park J., Lin S.H., Lee Y.T. Ab initio MO/

RRKM study of multichannel rate constants for the H+C₆H₅ reaction and the unimolecular decomposition of benzene. *J. Chem. Phys.*, 2001, 114, 8421-8435.

中文簡介：

本人主要研究興趣在於以應用為導向的量子化學計算，其包括多原子分子及自由基之基態及激發態的全初始分子軌域及密度泛函計算，並應用在電子光譜、振動光譜、化學反應以及燃燒、大氣、星際化學相關之光分解反應等。此類計算以高層及量子化學技巧像是 coupled cluster 法 (CCSD(T))、complete active space SCF (CASSCF) 和 multireference configuration interaction (MRCI) 法，並伴隨著大而易修改的基底、Gaussian-2 模型、現代密度泛函計算，可產生對電子基態及激發態都有相當的精確度 (0.1 eV)。例如在 1995 年我們改進了 Gaussian-2 法 (G2M) 其提供自由基反應之中間產物及過度態能量精確度至 1-2 kcal/mol，此進展現已廣泛用於已見於文獻之各種化學反應位能面的全初始研究。我們的計算顯示了一種極具價值的工具，可用於預測各種分子，自由基的物理化學性質，反應機構以及解釋實驗資料。

本人特別專注於燃燒及大氣反應之研究，如乙烯基、苯基及其他自由基的反應；火焰中之多原子碳氫化合物之生成反應機構；碳原子、氧原子及其他原子在不同電子能接的反應；芳香化合物及自由基之單分子分解反應等。我們對此類反應的位能面之理

論研究可提供相當精確的資料，諸如所有可能的反應中間產物及過度態之幾何及電子結構、振動頻率、轉動常數及相關能量。我們利用這些資料於各反應步驟之反應速率的 RRKM 及 TST 計算。反應速率式可解得為時間函數。這讓我們可預測在各種反應狀況下 (如不同溫度、壓力或能量) 之產物分量比。我們的理論計算提供了與交叉分子速及動力學之實驗結果相互對照，並對反應機構有更深入的觀點，同時亦使我們可去推測許多泛映途徑及產物分量比。我們的結果提供了碳氫自由基及其反應相關過程之結構異構物的生成機構。本人另一門主要研究方向是電子激發態之研究。像是提供多原子分子及自由基的電振態光譜之預測，其中包含精確的全始算，基態及激發態的震動頻率計算，以及垂直及絕熱躍遷能、震盪強度 (由振動重疊積分和 F-C 因子而得) 得計算。計算所得的函數亦可成為密度矩陣元素，以用於得到步同電子態之間的電振耦合常數及自旋-軌域耦合常數。這些耦合常數可能進一步用於在電振光譜的禁制躍遷強度以及內轉換、系統交叉作用的速率常數、光分解機構等。基於激發態位能面及電振光譜的全始計算結果還得出分解產物的個電子態分量比。另外，光分解動力學之非絕熱效應亦是研究興趣之一。近年來，本人的研究方向亦轉向大分子及團簇。此類低準確度的計算已可用於解釋實驗資料。近來的全始算及密度泛函理論法已可使我們能計算奈米大小團簇 (約為數百個原子) 之電子及光譜性質。例如結合 QM/MM 法 (像 ONION) 可以不同層級的理論以處理不同大小的團簇。其激發和放光能量可以時間相關的密度泛函理論計算而得。我們也將

此類的計算應用在建立矽奈米材料的模型並可用於定出實驗所得的紅外光譜。

評審簡評

梅亞歷 (A. M. Mebel) 博士是位十分傑出的理論化學家，他的理論計算為高難度的高精密計算，利用「全始分子軌域」和「密度函數」方法，計算多原子分子和自由基的基態和激發態位能面，應用於與燃燒化學、大氣化學、星際化學和其他有關化學之分子光譜、化學反應和動力學之研究。於 1996-2001 五年間共發表 92 篇論文，量多且質優。

三篇代表著作分別在國際最知名化學學術期刊 *J. Phys. Chem. A*, *J. Am. Chem. Soc.*, *J. Chem. Phys.* 發表。第一篇是受邀請之 feature article，探討小分子躍遷振動光譜，Dushinsky 效應對光吸收和非放射躍遷的影響，並考慮溫度效應。第二篇探討 C_4H_4 三重態的全面位能面以及 $C+C_3H_4$ 和 $C_2+C_2H_2$ 兩個反應途徑。第三篇是以全始分子軌域計算法和 RRKM 理論研究苯分子分解的多種反應途徑和 $H+C_6H_5$ 反應途徑，對苯分子被激發後各種異構化和斷鍵迴程作了徹底研究。此三篇論文均為極有份量工作，代表了梅博士三種不同類型的研究工作。

梅博士研究的特色是：除了自己的獨立研究外，他和原子分子研究所以及其他大學同仁共同合作，經由他的理論計算協助解釋實驗室觀測到的現象和數據，提昇了實驗工作的品質，也提高理論研究之影響力，對台灣學術界做出極大貢獻。

以他的成果來看，梅博士不但是台灣理論化學界的佼佼者，說他是世界上同輩中最優秀的年輕理論化學家之一，可不過份。我們很榮幸地能有他在台服務，因此毫無保留地極力推薦他。