

华中科技大学
Huazhong University of Science and Technology

可持续催化理论与 机制研讨会



会议手册

主办单位：华中科技大学科学技术发展院

承办单位：华中科技大学科学技术发展院基金办
华中科技大学化学与化工学院

协办单位：能量转换与存贮材料化学教育部重点实验室
材料化学与服役失效湖北省重点实验室

湖北·武汉

2023年5月27日

华中科技大学学术前沿青年团队前沿探索论坛

华中科技大学化学与化工学院简介

华中科技大学化学与化工学院源于1953年始建的华中工学院化学教研室。1981年原华中工学院化学教研室与物理教研室合并成立理化系；1983年成立华中工学院化学系，设立应用化学本科专业；1993年经教育部批准设立精细化工本科专业；2006年11月成立华中科技大学化学与化工系；2008年5月成立华中科技大学化学与化工学院。学院现有在岗教职员工141人，其中专任教师105人，教授（研究员）65人，副教授（副研究员）34人。教师队伍中有双聘院士1人，外籍院士1名，国家杰出青年科学基金获得者2人，国家百千万人才工程入选者2人，英国皇家化学会会士2人，国家优秀青年科学基金获得者5人，国家级青年人才11人，省部级人才61人。

学院目前在读本科生总数为650人左右，研究生550人左右，留学生15人左右。学院于2015年开始招收化学拔尖实验班，列入学校启明学院的基础学科拔尖人才培养体系，实行“三制三化”教育。2020年开始招收本硕博衔接培养的化学强基计划实验班。

学院坚持面向国家重大需求，聚焦科学前沿和关键领域开展研究。2008年以来获国家自然科学二等奖、国家科技进步二等奖等高水平奖励十余项。2016年以来，学院先后发表SCI论文1900余篇，其中在Science, Nature, J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed.等国际一流期刊上累计发表高水平论文70余篇；获授权专利360余件；承担国家重点研发计划课题、国家自然科学基金重点项目等十余项；获科技部重点领域创新团队1个、湖北省创新群体项目2项，研究成果已服务于国家重大工程，促进了学科和地方经济的发展。

会议通知

会议简介

为了推动光/电催化水分子和二氧化碳等能源小分子的转化研究，促进交叉学科之间的相互融合，促成从事光电催化相关研究的科学家间的实质性合作，共同发展光电可持续催化技术和理论新方法，华中科技大学化学与化工学院游波教授团队拟定于2023年5月26日至28日，在华中科技大学梧桐语问学中心召开“华中科技大学学术前沿青年团队前沿探索论坛——可持续催化理论与机制研讨会”，会议旨在了解和探讨光电可持续催化技术和理论研究的最新前沿进展。

会议主要安排

- 1.会议时间：2023年5月26日（星期五）——5月28日（星期日）
- 2.会议日程安排：
 - 5月26日 报到
 - 5月27日 会议报告
 - 5月28日 参会代表离会

会场及住宿

会场地点：华中科技大学（武汉市洪山区珞喻路1037号）
住宿地点：武汉华科大希尔顿欢朋酒店
（湖北省武汉市东湖新技术开发区关山街关山二路特9号）

会务组联系方式

廖荣臻，电话：15071100657，邮箱：rongzhen@hust.edu.cn
李 曼，电话：13476145676，邮箱：manli_hx@hust.edu.cn

日程安排

会议地点：华中科技大学梧桐语问学中心（问道厅）

5月26日（周五）	
8:00-18:00	会议报到 武汉华科大希尔顿欢朋酒店
18:00-20:00	晚宴 地点：福食缘
5月27日（周六）	
8:20-8:30	游波华中科技大学 开幕式致辞
会议报告（25分钟报告+5分钟提问） 8:30-10:00 主持人：吴梦昊	
8:30-9:00	陈雪波北京师范大学 均相光催化中的电子和能量转移理论模型
9:00-9:30	关威 东北师范大学 惰性键活化与偶联反应中的协同作用机制
9:30-10:00	蓝宇郑州大学 碱诱导的自由基物种生成机制
10:00-10:20	茶歇 合影
10:20-11:50 主持人：高军	
10:20-10:50	柯卓锋 中山大学 可持续催化精准设计：理论计算与电子结构的启发
10:50-11:20	洪鑫浙江大学 数据与机制融合的选择性预测
11:20-11:50	梁勇 南京大学 计算模拟助力功能分子设计和生物合成研究
11:50-14:30	午餐 地点：绿园自助餐厅

会议报告（25分钟报告+5分钟提问） 14:30-15:00 主持人：杨利明	
14:30-15:00	朱军香港中文大学（深圳） 含硼体系活化氮气的理论研究
15:00-15:30	彭谦 南开大学 稀土有机化学中动态结构调控作用的理论研究
15:30-16:00	钟龙华南方科技大学 Simulations & Prediction/Design of Complex Homogeneous Green Catalysis
16:00-16:20	茶歇
16:20-18:05 主持人：赵焱	
16:20-16:50	叶生发中科院大连化学物理研究所 能源小分子活化的反应机制
16:50-17:20	余沛源南方科技大学 不对称催化反应中的电子效应与立体选择性调控的理论计算研究
17:20-17:50	薛小松 中科院上海有机化学研究所 高价碘介导/催化的氟化和去芳构化反应机制研究
17:50-18:05	李曼华中科技大学 过渡金属协同催化及过渡金属-电催化反应机理的理论研究
18:30-20:00	晚宴 地点：湖锦酒楼
5月28日（周日） 参会代表离会	

其他校外参会人员

赵焱	武汉理工大学/武汉大学
高军	华中农业大学
盛翔	中科院天津工业生物技术研究所
杨玲	中国科学院大学温州研究院
黄跟平	天津大学
戚孝天	武汉大学
李胤午	中山大学
饶立	华中师范大学
张之涵	华中师范大学
李英英	郑州师范大学
张雅琼	湖北第二师范大学
张靖轩	比亚迪研究院
郑汉良	浙江师范大学

均相光催化中的电子和能量转移理论模型



陈雪波

报告人简介

陈雪波，北京师范大学化学学院教授，博士生导师，“烟台京师材料基因组工程研究院”院长。烟台先进材料与绿色制造山东省实验室学术战略咨询委员会委员兼材料数据库技术与高通量计算团队负责人。中国化学会理论化学专业委员会委员，光化学专业委员会委员、和中国化工学会化工新材料委员会委员。曾获得国家杰出青年基金（2017年），教育部新世纪优秀人才（2011年），全国百篇优秀博士论文（2007年），教育部科技进步一等奖（2010年）。曾担任十三五“新型显示与战略性电子材料”专项国家重点研发计划验收专家；主持十四五科技部国家重点研发计划“新型显示与战略性电子材料”专项、国际合作重点和国家杰青等项目。

报告摘要

Photocatalysis has experienced significant growth and become a powerful strategy to activate organic small molecules. It relies on the electron transfer (ET) or energy transfer (EnT) between the excited photosensitizers and substrates to generate highly reactive radical species, thus realizing transformations in an efficient and well-organized manner.[1] To build a benchmark for understanding these reactions, our group has modeled various photocatalytic reactions and developed the corresponding schemes for kinetic evaluation, by using highly accurate multiconfigurational electronic structure methods combined with Marcus electron transfer theory, transition state theory and Fermi's golden rule.[2-5] We envision that all of these efforts will provide abundant dynamic and kinetic information to help understand photocatalytic mechanism and facilitate the rational design of highly effective photosensitizers as well as the development of new-type activation modes.

参考文献

- [1] C. K. Prier, D. A. Rankic, D. W. C. MacMillan. Chem. Rev. 2013, 113, 5322.
- [2] W. J. Yang, X. B. Chen, W.-H. Fang. ACS Catal. 2018, 8, 7388.
- [3] J. J. Wang, W.-H. Fang, L. B. Qu, L. Shen, F. Maseras, X. B. Chen. J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 19406.
- [4] X. R. Zhang, L. Liu, W. J. Li, C. Wang, J. J. Wang, W.-H. Fang, X. B. Chen. JACS Au 2023, 3, DOI: 10.1021/jacsau.3c00098.
- [5] L. S. Ma, W.-H. Fang, L. Shen, X. B. Chen. ACS Catal. 2019, 9, 3672.

惰性键活化与偶联反应中的协同作用机制



关威

报告人简介

关威，东北师范大学化学学院教授，博士生导师。2003年和2008年于东北师范大学分别获得化学教育学士和物理化学博士学位，并留校工作。2009年至2014年先后在中科院长春应化所稀土资源利用国家重点实验室和日本京都大学福井谦一基础化学研究所从事博士后科研工作。近年来，主要围绕理论计算与模拟驱动精准化学合成研究方向开展理论和实验研究。以第一作者和通讯作者身份在J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed., ACS Catal., CCS Chem.等杂志发表论文50余篇，先后主持3项国家自然科学基金项目。2022年先后被评为吉林省拔尖创新人才和长春市有突出贡献专家。

报告摘要

催化作用是设计和实现新化学反应的最有效的策略之一。相较于成熟的单催化策略，协同催化在触发新反应、提高转换效率、改善立体选择性等方面有着突出的优点。近期，该课题组充分发挥理论计算的可靠性和前瞻性，在惰性键活化与偶联反应中的分子间协同作用机制上取得了一定的进展：从电荷转移、配位能力、抑制竞争角度揭示镍/Lewis酸催化活化C-CN键的选择性和协同作用本质；提出三核钛氢化合物活化苯分子中C=C键及其重排反应的“两态反应机制”，明确氢负离子和三核钛金属的协同作用本质；揭示镍/钨双催化Ullmann C-C交叉偶联反应作用所呈现出的“正交选择性”和“交叉选择性”的内在本质，并提出异相Zn选择性还原和促进转移金属化的双功能特性；金属光氧化还原协同催化C-C和C-X键交叉偶联反应的深入研究，揭示了由氧化淬灭光循环、还原淬灭光循环、过渡金属镍催化循环、氢原子转移循环组合的电子转移以及能量转移机制，探究两种机制的物理本质，进而明确手性配体结构与反应立体选择性之间的构效关系；并基于反应势能面和光物理性质的研究，开发了一种节能、高效、低成本、广谱的NiI-PPh₃/CuI协同的光氧化还原催化体系来实现烷基N-羟基羧酰胺与酚/仲胺的C(sp³)-O/N交叉偶联，并在10w蓝光LED照射4h下可以获得高达90%的产率。

碱诱导的自由基物种生成机制



蓝宇

报告人简介

蓝宇博士，郑州大学化学学院教授，博士生导师，河南省特聘教授。2018年获国家优秀青年基金。2020年入选国家特殊人才支持计划科技创新领军人才。蓝宇教授长期从事催化反应机制研究，主持国家自然科学基金项目4项。蓝宇教授获得“2016年中国化学会青年化学奖”。2018年，获重庆市自然科学奖一等奖（第一完成人）。

报告摘要

交叉偶联反应具有效率高，选择性好，反应条件温和等优点，是现代有机合成的有效途径。其中，自由基引发是形成自由基中间体的关键步骤。通常，加热可以使共价键发生均裂形成自由基中间体。但是，这也往往依赖于高活性化学键的均裂（例如氧氧键），有着很多的局限性和不可控性。因此，如何引发惰性物种产生自由基精准实现官能团化是一个重要的科学问题。最近，我们通过计算发现在氮杂化卡宾（NHC）催化的醛和氧化剂NHPI酯的交叉偶联反应中，碱参与并促进了Breslow和NHPI酯之间的质子耦合电子转移（relayed-PCET）过程生成了两个自由基中间体。随后，自由基-自由基的交叉偶联生成目标产物。同时，跟踪轨道图像变化详细的描述了relayed-PCET和自由基-自由基交叉偶联过程。除此之外，我们最近的另外一个研究工作中也发现了磷酸盐可以协助弱氧化剂硅烷的氢原子转移（HAT）过程直接构建硅自由基。

参考文献

- [1] Qi, X.-T.*; Lan, Y.* Acc. Chem. Res. 2021, 54, 2905-2915.
- [2] Duan, M.; Díaz-Oviedo, C. D.; Zhou, Y.; Chen, X. Y.; Yu, P.; List, B.*; Houk, K. N.*; Lan, Y.* Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 134, e202113204.
- [3] Shi, Q. Q.; Pei, Z. P.; Song, J. S.; Li, S. -J.; Wei, D. H.*; Coote, M. L.*; Lan, Y.* J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 3137-3145.
- [4] Yang T.; Jiang Y.; Luo Y. X.; Lim, J. J. H.; Lan, Y.*; Koh, M. J.* J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 51, 21410-21419.

可持续催化精准设计：理论计算与电子结构的启发



柯卓锋

报告人简介

柯卓锋，中山大学教授/博士生导师，逸仙学者。国家高层次青年人才、广东省自然科学杰出青年基金、“广东特支”百千万工程青年拔尖、日本福井谦一FIFC Fellow、中山大学“百人计划”，中山大学美国北德克萨斯大学联合培养博士。研究方向为物理有机、绿色合成、材料化学。在基于电子结构和理论计算的催化剂精准设计、反应机理、分子转化新方法在可持续能源、绿色合成、可持续材料等领域做出了系列成绩，成果已在Nat. Commun., J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed., ACS Catal.等杂志发表SCI论文150余篇，H-index=40。任职Chinese Chemical Letters青年编委以及Molecules编委。

报告摘要

催化剂的电子结构对催化性能具有决定性的影响。我们课题组一直致力于基于电子结构的催化剂理性设计研究。相对于传统的试错设计，我们在理论计算设计的支撑下，近期成功精准设计了系列原创性的高效绿色催化体系，实现了其在可持续能源、可持续绿色合成方面的催化应用[1-6]。因此我们将结合课题组在理论指导实验方面的进展，围绕“配体场畸变与烷氧势阱”等电子结构的认识，向大家汇报我们近期在电子结构启发的催化剂设计工作进展。

参考文献

- [1] Huang, H.-H.; Zhang, J.-H.; Dai, M.; Liu, L.; Ye, Z.; Liu, J.; Zhong, D.-C.; Wang, J.-W.; Zhao, C.; Ke, Zhuofeng*. Proc. Natl. Acad. Sci. 2022, 119, e2119267119.
- [2] Ye, Z.; Yang, Z.; Yang, C.; Huang, M.; Xu, X.; Ke, Zhuofeng*. Org. Chem. Front. 2022, 9, 4803-4817.
- [3] Li, Y.; Su, P.; Jiang, J.; Ke, Zhuofeng*. ACS Catal. 2021, 11, 13452-13462.
- [4] Li, W.; Huang, M.; Liu, J.; Huang, Y.-L.; Lan, X.-B.; Ye, Z.; Zhao, C.; Liu, Y.; Ke, Zhuofeng*. ACS Catal. 2021, 11, 10377-10382.
- [5] Li, Y.; Liu, J.; Huang, X.; Qu, L. B.; Zhao, C.; Langer, R.; Ke, Zhuofeng*. Chem. Eur. J. 2019, 25, 13785-13798.
- [6] Huang, M.; Li, Y.; Li, Y.; Liu, J.; Shu, S.; Liu, Y.; Ke, Zhuofeng*. Chem. Commun. 2019, 55, 6213-6216.

数据与机制融合的反应选择性预测



洪鑫

报告人简介

洪鑫，浙江大学化学系教授、博士生导师，2010年本科毕业于中国科学技术大学，2014年博士毕业于加州大学洛杉矶分校。2014-2016年分别于加州大学洛杉矶分校与斯坦福大学从事博士后研究工作。2016年加入浙江大学化学系，任百人计划研究员。作为课题组负责人长期从事合成反应机制与构效关系方向的研究工作。以基元过程的分子形变和结合作用为核心，积极开展惰性化学键活化转化研究。建立了一系列惰性化学键活化的机理模型，明确了相关反应活性和选择性的控制因素，运用机器学习策略构建了构效关系预测模型，为惰性化学键活化反应的理性设计提供了机理规律和智能方案。自独立工作以来以通讯和共同通讯作者身份于Nat. Chem., Nat. Catal., Nat. Syn., J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed.等国际高水平期刊发表论文100余篇。

报告摘要

反应选择性的调控机制与准确预测是精准合成的重要环节，在学术研究和工业应用中具有重要的价值。得益于化学大数据的迅速积累与人工智能技术的蓬勃发展，人工智能与合成化学的交叉融合为反应选择性的理解和预测提供了全新的方法论。基于机器学习的合成反应精准设计和智能优化有望成为下一代优化策略，助力合成化学的精准设计。本次报告将从合成反应的数据库建设[1]、合成体系的智能编码[2]、反应选择性的建模预测[3-4]等方向，介绍课题组近期的研究进展，探讨如何将反应机制认识融入并助力人工智能化学的研究，并讨论其中亟待解决的科学问题[5-6]。

参考文献

- [1] Xu, L.-C.; Zhang, S.-Q.; Li, X.; Tang, M.-J.; Xie, P.-P.; Hong, X. Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 22804.
- [2] Li, S.-W.; Xu, L.-C.; Zhang, C.; Zhang, S.-Q.; Hong, X. Nat. Commun. 2023, accepted.
- [3] Li, X.; Zhang, S.-Q.; Xu, L.-C.; Hong, X. Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 13253.
- [4] Xu, L.-C.; Frey, J.; Hou, X.; Zhang, S.-Q.; Li, Y.-Y.; Oliveira, J. C. A.; Li, S.-W.; Ackermann, L.; Hong, X.; Nat. Synth. 2023, DOI: 10.1038/s44160-022-00233-y.
- [5] Oliveira, J. C. A.; Frey, J.; Zhang, S.-Q.; Xu, L.-C.; Li, X.; Li, S.-W.; Hong, X.; Ackermann, L. Trends Chem. 2022, DOI: 10.1016/j.trechm.2022.07.005.
- [6] Zhang, S.-Q.; Xu, L.-C.; Li, S.-W.; Oliveira, J. C. A.; Li, X.; Ackermann, L.; Hong, X. Chem. Eur. J. 2022, 29, e202202834.

计算模拟助力功能分子设计和生物合成研究



梁勇

报告人简介

梁勇，南京大学化学化工学院教授，博士生导师，江苏特聘教授。2005年获北京大学学士学位；2010年获北京大学理学博士学位。2012–2015年，美国加州大学洛杉矶分校，化学与生物化学系博士后。2015年11月至今被南京大学化学化工学院聘为教授。2015年入选国家级青年人才计划，2017年获中国化学会—物理有机化学新人奖，2019年入选江苏省“双创”团队领军人才，2020年获霍英东教育基金会第十七届高等院校青年教师奖，2022年获南京大学青年五四奖章。主要从事：（1）计算和实验相结合研究有机化学反应的机理；（2）计算机辅助设计用于有机合成的新催化剂和反应；（3）计算指导新生物正交试剂的设计与应用；（4）天然产物生物合成中涉及的有机反应和酶催化机制。已在Nature, Chem, Nat. Commun., J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed.等国际高水平学术期刊上发表论文120余篇，他引5500余次。

报告摘要

我们以DFT计算为指导，通过精准调控配体的几何形状和距离，以及非共价键相互作用，设计合成了含邻菲罗啉骨架和联吡啶骨架的两大类配体，通过底物与配体之间的氢键识别导向作用，成功实现了铱催化的芳香酰胺、磷酸酯、硼酸酯等的可调控的间位和对位选择性硼化反应。该反应具有广泛的底物范围和良好的官能团兼容性，再结合多转化导向基的丰富转化，可以从多维度进行后期官能团化，从而快速高效地实现了多取代芳烃的合成。

参考文献

- [1] Zhang, B.#; Wang, K. B.#; Wang, W.#; Wang, X.#; Liu, F.; Zhu, J.; Shi, J.; Li, L. Y.; Han, H.; Xu, K.; Qiao, H. Y.; Zhang, X.; Jiao, R. H.; Houk, K. N.*; Liang, Y.*; Tan, R. X.*; Ge, H. M.* Nature 2019, 568, 122.
- [2] Wang, X.#; Zhang, C.#; Jiang, Y.; Wang, W.; Zhou, Y.; Chen, Y.; Zhang, B.; Tan, R. X.; Ge, H. M.*; Yang, Z. J.*; Liang, Y.* J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 21003.
- [3] Chen, Y.#; Zhao, R.#; Tang, C.; Zhang, C.; Xu, W.; Wu, L.; Wang, Y.; Ye, D.; Liang, Y.* Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202112734.
- [4] Chang, W.#; Chen, Y.#; Lu, S.#; Jiao, H.; Wang, Y.; Zheng, T.; Shi, Z.; Han, Y.; Lu, Y.; Wang, Y.; Pan, Y.; Yu, J.-Q.; Houk, K. N.; Liu, F.; Liang, Y.* Chem 2022, 8, 1775.
- [5] Lu, S.; Zheng, T.; Ma, J.; Deng, Z.; Qin, S.; Chen, Y.; Liang, Y.* Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202201285.

含硼体系活化氮气的理论研究



朱军

报告人简介

朱军，香港中文大学（深圳）教授，博士生导师。2000年和2003年分别于厦门大学获学士学位和硕士学位，2007年11月在香港科技大学获博士学位。2007年11月至2010年7月先后在香港大学和瑞典乌普萨拉大学从事博士后科研工作。2010年7月回国入职厦门大学化学化工学院并开展理论计算研究，2023年4月入职香港中文大学（深圳）理工学院。近年来，主要围绕理论计算、物理有机化学、芳香性理论开展科学研究。以第一作者和通讯作者身份在Nat. Chem., Nat. Commun., J. Am. Chem. Soc., Acc. Chem. Res.等杂志发表论文190余篇。

报告摘要

氮气因含自然界中最强的三键（键能：945 kJ/mol）在温和条件下的活化相对较难[1]。目前工业界使用传统哈伯法进行大规模固氮合成氨，每年不仅间接导致了约3亿吨的二氧化碳排放，还消耗了全球约2%的能源。基于本课题组在芳香性领域的研究兴趣[2]，通过密度泛函理论计算我们预测了一系列含硼-碳体系的受阻路易斯酸碱对在温和条件下活化氮气，从两配位硼[3–5]到三配位硼[6–7]，从主族体系到过渡金属[8]，从计量反应到催化反应[9]。进一步的研究表明，大部分反应的过渡态或产物具有不同程度的芳香性，因而可实现该类反应在热力学和动力学上均有利，揭示了含硼化合物在氮气活化领域的潜力[3–9]。

参考文献

- [1] Zhu, J. Commun. Chem. 2020, 3, 161.
- [2] Chen, D.; Xie, Q.; Zhu, J. Acc. Chem. Res. 2019, 52, 1449.
- [3] Zhu, J. Chem. Asian J. 2019, 14, 1413.
- [4] Rouf, A. M.; Huang, Y.; Dong, S.; Zhu, J. Inorg. Chem. 2021, 60, 5598.
- [5] Zeng, J.; Su, J.; You, F.; Zhu, J. Chin. Chem. Lett. 2023, 34, 107759
- [6] Rouf, A. M.; Dai, C.; Xu, F.; Zhu, J. Adv. Theory Simul. 2020, 3, 1900205.
- [7] Rouf, A. M.; Dai, C.; Dong, S.; Zhu, J. Inorg. Chem. 2020, 59, 11770.
- [8] Dong, S.; Zhu, J. Chem. Asian J. 2021, 16, 1626.
- [9] Zhu, Q.; Qiu, R.; Dong, S.; Zeng, G.; Zhu, J. Chem. Asian J. 2021, 16, 2063.

稀土有机化学中动态结构调控作用的理论研究



彭谦

报告人简介

彭谦，南开大学化学学院及元素有机化学国家重点实验室研究员，博士生导师，国家“四青”人才，天津市杰青，欧盟玛丽居里学者。2004年中山大学化学系获理学学士学位，2009年中科院上海有机所（导师吴云东院士）获有机化学博士学位。随后在美国 University of Notre Dame, Texas A&M University 和英国牛津大学分别进行理论计算化学研究。于2017年在入职南开大学化学学院，已在 Acc. Chem. Res., J. Am. Chem. Soc., Nat. Commun., Angew. Chem. Int. Ed. 等国际权威期刊共发表学术论文共60余篇。曾获国家自然科学基金二等奖（R5），欧盟玛丽居里奖，Thieme Chemistry Journals Award，科睿唯安高被引科学家，中国化学会计算（机）化学专业委员会委员。先后主持国家级科研项目6项（含基金委重大项目和重大研究计划课题），省部级项目2项。担任 Nat. Chem., Nat. Catal., Nat. Syn., J. Am. Chem. Soc. 等期刊审稿人，担任科技部重点研发计划会评委员，任国家级本科精品课程《结构化学》主讲教师，主持国家级教学项目2项。目前主要方向为稀土有机化学、不对称催化的理论计算研究。

报告摘要

微观化学反应机制的新发现为认识化学规律提供重要依据，而计算化学在反应机制研究中日趋重要。在化学反应机制中，一些低能垒动态变化和弱相互作用，往往被人忽视。针对稀土有机反应机制中动态配位和次级轨道相互作用问题，阐述我们基于理论计算的新发现，揭示其在化学转化中的关键前线轨道和次级作用，如稀土金属空轨道形成的 σ -d 和 π -d 作用导致动态配位现象；以及元素分子的 p 轨道与稀土金属空 d 轨道作用，从而打破传统局限的稀土元素键的 σ -键复分解机制，将机理拓展到罕见的 1,2-消除机理的新领域，为动态配位提供了轨道作用基础。此外还揭示稀土 Lewis 酸催化转化的配体动态配位调节理论规律，深入理解不对称转化中的动态控制的机理。

Simulations & Prediction/Design of Complex Homogeneous Green Catalysis



钟龙华

报告人简介

钟龙华，南方科技大学化学系教授，博士生导师。分别在2000、2003和2006年获得香港科技大学一级荣誉学士、硕士和博士学位，师从吴云东院士，研究金属催化有机反应机理。2006–2013年到京都大学福井谦一纪念研究中心 Keiji Morokuma 院士组，采用和发展多尺度模拟方法研究复杂生物金属酶和光生物体系。2013年10月起加入南方科技大学化学系任独立课题组组长和预聘助理教授，研究复杂均相催化化学和生物体系，新模拟方法的发展及应用，2018年破格晋升预聘副教授，2021年破格晋升长聘正教授。在国外期刊上发表88篇SCI论文，包括 Chem. Rev., Acc. Chem. Res., J. Am. Chem. Soc., Angew., Nat. Commun., Wiley 跨学科综述, Chem. Sci., ACS Catal., J. Phys. Chem., J. Chem. Theory Comput. 等。

报告摘要

Computational chemistry has played an indispensable role in understanding mechanisms of many homogenous green and biological catalysis, as well as even discovering new reaction mechanisms or making new predictions.[1–3] In this talk, I will present 1) our prediction on the first excited-state heavy-atom (carbon) tunneling in a photo-induced reaction in 2017,[2] which has been experimentally verified by the Singleton group by ^{13}C KIE measurement in 2020, and 2) pronounced effects of the metal (spin and coordination) on abnormal KIE & reaction dynamics of the Fe(III)-catalyzed hetero-Diels-Alder reaction.[3] Our mechanistic study also enables our computational predictions of the enantioselectivity reversal of the Cu(I)-catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition, which were verified experimentally.[4]

参考文献

- [1] (a) Lan, J.; Li, X.; Yang, Y.; Zhang, X.; Chung, L. W.* Acc. Chem. Res. 2022, 55, 1109. (b) Ni-LarA: Zhang, X.; Chung, L. W.* Chem. Eur. J. 2017, 23, 3623. (c) Cu: Lan, J.; Liao, T.; Zhang, T.; Chung, L. W.* Inorg. Chem. 2017, 56, 6809. (d) Co: Wu, S.-B.; Zhang, T.; Chung, L. W.*; Wu, Y.-D. Org. Lett. 2019, 21, 360.
- [2] Photo: (a) Li, X.; Liao, T.; Chung, L. W.* J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 16438. (b) Ma, F.; Yan, Z.; Li, X.*; Chung, L. W.* J. Phys. Chem. Lett. 2023, 14, 1124.
- [3] Fe: Yang, Y.; Zhang, X.; Zhong, L.; Lan, J.; Li, X.; Li, C.-C.; Chung, L. W.* Nat. Commun. 2020, 11, 1850.
- [4] Chang, X.; Yang, Y.; Shen, C.; Xue, K.-S.; Wang, Z.-F.; Tao, H.-Y.; Chung, L. W.*; Wang, C.-J.* J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 3519.

能源小分子活化的反应机制



叶生发

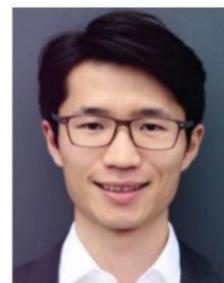
报告人简介

叶生发，中国科学院大连化学物理研究所研究员，博士生导师。1994-2001年于北京大学就读，获学士学位和硕士学位；2005年于德国斯图加特大学获博士学位。2005-2009年在德国马克斯-普朗克生物无机化学研究所和德国波恩大学从事博士后研究；2009-2019年先后于德国波恩大学、德国马克斯-普朗克化学能源转换研究所和煤炭研究所任课题组组长；自2020年起，在中国科学院大连化学物理研究所工作，任生物无机催化研究组组长。其研究团队主要致力于发展光谱学理论和研制先进的光谱学仪器，并将发展的光谱学表征技术与理论计算结合，研究金属酶和模型配合物活化能源小分子的反应机制。

报告摘要

能源小分子的活化与转化是人类社会实现可持续发展的基础。自然界的多种金属酶可以高效地催化这类反应，因此亟需在电子结构层次理解金属酶高催化活性的原因，从而设计出高效绿色的催化剂。本次报告将简要介绍如下研究工作：通过理论计算与光谱学结合的方法，探究非血红素铁蛋白及其模型配合物活化氧气进而氧化低碳烷烃的反应机制。

不对称催化反应中的电子效应与立体选择性调控的理论计算研究



余沛源

报告人简介

余沛源，南方科技大学化学系助理教授，博士生导师。2012年于新加坡南洋理工大学获得学士学位，2017年在美国加州大学洛杉矶分校获博士学位。2017年至2019年在美国劳伦斯伯克利国家实验室从事博士后科研工作。2019年9月入职南方科技大学，其研究方向包括有机反应和酶催化反应的机理研究与理论计算、具有立体选择性的有反应的催化剂设计与改进以及基于人工智能/深度学习方法的分子模拟和酶设计。在Nat. Commun., J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem. Int. Ed., Org. Chem. Front.等国际知名杂志发表研究成果论文60余篇。2019年入选中组部国家特聘专家（青年）计划，2020入选深圳市海外高层次人才计划（B类），并在2021年获得中国化学会物理有机化学新人奖。

报告摘要

不对称催化通过高效、高选择性的催化方法来实现手性物质的精准构筑，是现代合成化学的重要组成部分。探究催化剂、底物的微观结构与催化性能的内关联，构建催化剂、底物结构与反应选择性特别是立体选择性的构效关系是不对称催化领域关注的科学问题之一。取代基的电子效应作为决定分子物理性质和反应性的重要因素，在不对称催化反应中的构效关系中扮演着重要的角色。近年来，研究者发现电子效应主导的非共价相互作用对反应活性与选择性具有至关重要的影响，传统的空间位阻效应无法解释的催化体系日趋增加。基于此，我们对一系列不对称催化体系中的电子效应进行了深入的理论计算研究，提出了分子中的原子极化率影响不对称催化反应立体选择性的假说，并取得了一些初步的研究进展：在几例经典的不对称催化反应体系中建立了极化率与反应立体选择性之间的定性和定量关系；另外，我们发现分子中的原子极化率与其反应性之间也存在良好的相关性。这些研究结果有助于我们更加深入地理解催化反应中的电子效应，同时也能为基于机制和数据驱动的反应设计提供理论基础与实用工具。

高价碘介导/催化的氟化和去芳构化反应机制研究



薛小松

报告人简介

薛小松，中国科学院上海有机化学研究所研究员、博士生导师。2013年博士毕业于南开大学，师从程津培院士，并于同年留校任教，2016年晋升为副教授。2018年入选“南开大学百名青年学术带头人”计划。2017年9月-2020年8月，UCLA访问学者，师从Houk院士。2021年8月加入中国科学院上海有机化学研究所有机氟化学重点实验室，任“百人计划”研究员、课题组长，并于同年获得国家优青和中科院率先行动“百人计划”支持。

报告摘要

由于有机氟化合物的独特反应性，现有指导有机化学反应的规律常常失效，但适用于有机氟化学反应的规律又缺乏系统的研究和总结，使得新试剂和反应的理性开发极具挑战。过去几年里，我们将物理有机化学的原理和方法应用于有机氟化学领域，力图探索和揭示有机氟化学独特反应性的科学本质与规律，促进新试剂和反应的理性设计与开发。本报告主要介绍我们在高价碘介导/催化的氟化和去芳构化反应机制方面的研究进展。

参考文献

- [1] Uneyama K., Organofluorine Chemistry, Blackwell Publishing, Oxford, 2006.
- [2] Ni C.; Hu J.; Chem. Soc. Rev. 2016, 45, 5441.
- [3] Li M.; Xue X. S.*; Cheng J.P., Acc. Chem. Res. 2020, 53, 182.
- [4] Zheng H.; Liu C.; Pan M., Uyanik M., Ishihara K., Xue X. S.*; J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 7301-7312.
- [5] Zheng H.; Sang, Y.; Houk, K. N.*; Xue, X. S.*; Cheng, J. P., J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 16046-16056.
- [6] Zhou B.; Haj M. K.; Jacobsen E. N.; Houk, K. N.*; Xue X. S. *, J. Am. Chem. Soc. 2018, 140, 15206-15218.
- [7] Zhou B., Yan T., Xue, X. S.*; Cheng, J. P., Org. Lett. 2016, 18, 6128-6132.

过渡金属协同催化及过渡金属-电催化反应机理的理论研究



李曼

报告人简介

李曼，华中科技大学副教授。2013年于四川大学获学士学位，随后于2018年在南开大学获博士学位，师从程津培院士、薛小松研究员。2018年-2021年在瑞典斯德哥尔摩大学从事博士后研究工作。2021年3月回国入职华中科技大学大学化学化工学院并开展理论计算研究。近年来，主要围绕均相过渡金属协同催化以及过渡金属-电催化反应机理开展理论研究工作。以第一作者和通讯作者身份已在 Nat. Commun., Acc. Chem. Res., ACS Catal., ChemSusChem等杂志发表论文。

报告摘要

过渡金属催化是现代有机合成中精准构建化学键强有力的工具。双过渡金属协同催化策略使用两种过渡金属催化剂分别同时活化亲核体和亲电体，有效实现单过渡金属催化模式难以完成的化学转化。与此同时，过渡金属-电催化的有机合成方法以电的氧化还原能力与过渡金属催化相结合，避免使用化学氧化还原剂，绿色高效，亦成为当前发展C-H键活化官能团化反应的研究热点。我们采用DFT计算考察了Pd-Cu协同催化烯丙基取代反应的机理和选择性起源、探究了Rh-电催化磷酸化反应机理并剖析了电化学过程的关键作用。

参考文献

- [1] Liu, H.; Huang, Q.; Liao, R. Z.; Li, M.*; Xie, Y.* Nat. Commun. 2023, 14, 1883.
- [2] Ding, C. Y.; Li, M.*; Liao, R. Z.*; Chem. Asian J. 2023, 18, e202201259.
- [3] Hu, L.; Liu, Y.; Fang, X.; Zheng, Y.; Liao, R.-Z.; Li, M.*; Xie, Y.* ACS Catal. 2022, 12, 5857.
- [4] Li, M.*; Liao, R.-Z.*; ChemSusChem 2022, 15, e202200187.
- [5] Zhang, Y.-Q.; Wang, Z.-H.; Li, M.*; Liao, R.-Z.* J. Catal. 2022, 414, 277.

