

第17期CJC论坛暨优秀论文作者 (2020年) 学术报告会

报告时间: 2023年3月25日
报告地点: 君谋楼报告厅
欢迎听讲!



帅志刚 教授
香港中文大学 (深圳) / 清华大学

报告题目: 热振动关联函数理论与MOMAP计算软件的开发

报告摘要: 理论计算化学的核心是发展计算方法, 尽管目前的计算化学软件已经能够基本解决化学的结构问题, 主要是基态问题。但是涉及到分子和材料的性质, 包括光电响应性能的预测, 仍然缺少可靠而实用的方法, 尤其是与激发态相关的性能, 是计算化学的挑战之一。以发光过程为例, 计算软件可以给出大致可靠的发光波长, 但是对于发光谱型和发光效率一直没有好的方法, 这是因为这与电子激发态的振动耦合与弛豫过程相关, 时间尺度从纳秒到毫秒, 比微观理论能处理的飞秒-皮秒长的多, 典型的电子态演化的步长是阿秒, 从而会带来累积误差。我们在微扰论的框架下, 提出了TVCF (Thermal Vibration Correlation Function) 的理论形式, 得到了非绝热跃迁速率的含时积分的解析表达式, 可以高效地应用于计算发光效率、发光光谱、电荷迁移率等性能。我们将该方法编制成计算软件MOMAP (Molecular Materials Property Prediction Package)。先前是在网上公开发布, 很受欢迎, 很快就被下载了2600多次, 包括哈佛、斯坦福等高校以及剑桥显示、三星等有机发光知名企业。在此基础上, 我们将软件著作权转让给上海鸿之微科技有限公司, 作商业化软件销售, 5年来商业用户超过135家, 包括近20家海外用户, 也有日本住友等5家化工企业。本报告将重点介绍我们在澄清国际上对有机/高分子电导机制、载流子迁移率以及发光过程的研究, 我们还将介绍国际同行应用MOMAP软件取得的研究成果。



石枫 教授
江苏师范大学/常州大学

报告题目: 手性吡啶化学

报告摘要: 手性吡啶类化合物在手性药物、手性催化剂、手性功能材料的研发等方面显示出了巨大的潜力。但是, 手性吡啶化学的发展却只有十几年的时间, 属于一个亟待发展的重要领域。现代合成化学正朝着精准高效和高选择性这一方向发展, 所以手性吡啶类化合物的高效、高选择性合成已经成为手性吡啶化学领域的关键科学问题。我们课题组围绕这一关键科学问题开展了系统性研究工作, 针对吡啶不对称转化的传统方式中存在的挑战性问题, 提出了构建手性吡啶杂环骨架的新策略: 设计和开发新型吡啶类平台分子及其参与的催化不对称新反应。在此策略指引下, 实现了新型手性吡啶类化合物的高效、高选择性合成; 发现了吡啶类平台分子的独特反应性和选择性, 阐明了反应规律和理论根源, 探索了协同催化模式并阐明其机制, 促进了手性吡啶化学的发展。本报告将汇报我们课题组在手性吡啶化学领域的最新研究进展。



池永贵 教授
Prof. Yonggui Robin Chi
南洋理工大学/贵州大学

报告题目: NHC Catalysis, Medicines, and Agrochemicals

报告摘要: The Chi laboratory is committed to the state-of-art research that addresses problems of both fundamental and practical significance in the areas of chemical synthesis, medicines, and agrochemicals. For the first ten years, one of the research focuses concerns developing new activation modes and synthetic transformations enabled by N-Heterocyclic Carbene (NHC) as the key organic catalyst. At present during the second ten years, the Chi lab is giving more weights on functions of molecules (mostly as medicines and agrochemicals) and moving beyond laboratory scale development. Examples of current projects include chemo-selective reactions (and precise editions) for bioactive complex (bio)molecules and their analogous (such as saccharides), antibacterial and antiviral agricultural chemicals, chiral herbicides, medicinal molecules and prodrugs, ultra-efficient reactions, and green process for industrial scale applications.



孙道峰 教授
中国石油大学 (华东)

报告题目: 晶态多孔材料的结构调控及其气体分离性能研究

报告摘要: 低碳烃的高效低能耗分离对于高纯化工产品的生产具有重大战略价值, 晶态多孔材料在低碳烃分离领域展示出独特优势。报告将围绕晶态多孔材料结构调控、吸附剂和分离膜的构筑展开: 1) 发展了多组分协同调控、分子枢轴铰链、多金属位点孔环境工程调控等策略, 实现了晶态多孔材料结构精准调控; 2) 明确了框架与气体分子之间的主客体相互作用机制, 揭示了框架结构对气体吸附和分离性能的影响机理; 3) 将晶态多孔材料作为有序单体与高分子单体通过界面聚合策略构筑柔性、超薄、可扩大化制备的膜材料, 借助孔径筛分效应, 实现了系列膜材料在能源环境领域的应用。

时间	议程	主持人
9:20-9:30	开幕致辞	游书力
9:30-10:30	帅志刚 (香港中文大学 (深圳)) / 清华大学 热振动关联函数理论与MOMAP计算软件的开发	刘国生
10:30-11:30	石枫 (江苏师范大学/常州大学) 手性吡啶化学	
14:00-15:00	池永贵 (新加坡南洋理工大学/贵州大学) NHC Catalysis, Medicines, and Agrochemicals	王新平
15:00-16:00	孙道峰 (中国石油大学 (华东)) 晶态多孔材料的结构调控及其气体分离性能研究	
16:00-16:10	闭幕	麻生明



WILEY-VCH



第 17 期 CJC 论坛暨优秀论文作者(2020 年)学术报告会

时间: 2023 年 3 月 25 日

会议地点: 君谋楼报告厅

欢迎听讲!

2023 年 3 月 25 日 (星期六)		
9:20-9:30	开幕致辞	游书力
会议报告		
时间	报告人及报告题目	主持人
9:30-10:30	帅志刚 (香港中文大学 (深圳)) /清华大学 热振动关联函数理论与 MOMAP 计算软件的开发	刘国生
10:30-11:30	石枫 (江苏师范大学/常州大学) 手性吡啶化学	
14:00-15:00	池永贵 (新加坡南洋理工大学/贵州大学) NHC Catalysis, Medicines, and Agrochemicals	王新平
15:00-16:00	孙道峰 (中国石油大学 (华东)) 晶态多孔材料的结构调控及其气体分离性能研究	
16:00-16:10	闭幕	麻生明