大连化物所因公出访事后公示表

出访人团组成员基本信息:

姓名	部门	职务
王永	1101 组	副研究员

实际执行情况:

2013年11月3日 大连-济州

2013年11月3-2013年11月7日参加第四届亚洲配位化学会议

2013年11月8日 济州-大连

经费开资情况:

往返国际机票: 2978 元;

住宿费: 680500 韩元

注册费: 781000 韩元

出访总结:

第四届亚洲配位化学会议"4th Asian Conference on Coordination Chemistry" 于 2013 年 11 月 4 日至 7 日在韩国济州岛国际会议中心举行。 该会是配位化学 领域最重要的国际学术会议之一。会议涵盖了无机与配位化学、生物无机及生物 材料化学、多孔及大分子化学、纳米及表面化学等研究领域。

我所王永副研究员此次应邀,并作了题为"The magic power of acid adduct in nonheme chemistry"的邀请报告(Invited talk)。在报告中向与会者介绍了密度泛函理论(DFT)在仿生模拟催化过程中对活性中间体的发现、属性及催化效率等方面所具有的强大力量;首次提出了环状过氧化正铁中间体是一种有效的活性中间体,可以高效并选择性的催化烷烃羟基化反应;并将此活性中间体与五价铁氧活性中间体的形成及催化特性进行比较,推翻了目前此领域广泛认可的酸性条件下涉及五价铁-氧活性中间体的反应机理,提出了新的假设机理,该机理很好的解释了目前所观测到的实验现象,并对新型催化剂的涉及提供了一定的理论指导。报告引起了与会者的关注并在提问阶段进行了热烈的讨论。此外,王永副研究员还获邀为11月5日下午13:30-15:10阶段的会场主席(chair for 4 talks)。

此次会议扩大了我们小组在国际上的影响,而其有利于加强我所与国际同行在配位化学领域国际前沿课题的合作。