

【无机化学论坛】迈向理性与高效—计算与数据

驱动的 MOFs 研发新范式

报告人：王戈 教授

北京科技大学材料科学与工程学院

时间：2023 年 04 月 26 日（周三）下午 15:00-16:30

地点：北京大学化学学院 A 区 717 报告厅.



迈向理性与高效—

计算与数据驱动 MOFs 研发新范式

金属-有机骨架（Metal Organic Frameworks, MOFs）具有种类繁多、活性位点丰富、孔道可调等特点，既为开发高性能催化材料提供了机遇，同时也对传统的实验试错型研发模式提出了巨大挑战。近年来，跨尺度高通量计算设计、以“大数据+AI”为标志的数据驱动技术等材料基因工程手段蓬勃发展，为特定功能 MOFs 材料的批量化精准预测和智能化靶向定制提供了崭新的契机。材料计算、机器学习和实验迭代的交互融合为广域化学空间中特定性能 MOFs 的定向合成提供了有力手段；耦合结构生成、结构组装、性能反馈等功能的逆向设计方法则能够突破先验知识，实现 MOFs 最佳组成结构的智能化自主寻优。基于计算和数据双驱动的材料理性设计与合成规划新策略，加速了 MOFs 合成由“随机尝试”向“精准定制”的转变进程，为高品质航油制备、电解水制氢等领域关键催化材料的低成本短周期开发提供方法路径。

报告人简介：王戈，女，2002 年于美国 Michigan Technological University 化学系获得理学博士学位，现为北京科技大学材料科学与工程学院教授、博士生导师。2002 年入选北京市科技新星计划，2005 年入选教育部新世纪优秀人才支持计划，2006 年获霍英东青年教师基金资助，2012 年被聘为教育部“长江学者奖励计划”

特聘教授，2013 年入选国家百千万人才工程，并被授予“有突出贡献中青年专家”荣誉称号，2015 年获宝钢优秀教师特等奖提名奖、全国冶金教育系统年度杰出人物奖。

围绕绿色催化、低碳能源等方向，建立了基于材料基因工程思想的理性设计方法，发展了功能属性单元跨尺度定向构筑新策略，形成了从精准预测到数字化放大生产的材料研发新范式，获得了系列高性能金属有机骨架基催化材料和相变储能材料，并推进了其在高品质航油生产、CO₂ 吸附及转化等领域的应用。在 Chem. Rev., Joule, Energy Environ. Sci., Matter, Nature. Common., Adv. Mater. 等期刊发表 SCI 收录论文 200 余篇，获国家发明专利授权 80 余项。研究工作先后被 ACS News, Nanotechweb, Science Daily 等多家美国、英国、中国的科研及新闻媒体做专题报道或亮点评述。多次担任功能材料及交叉领域国际会议的联合主席、组委会副主席及科学委员会委员，并在多个国内外学术会议上做特邀报告。兼任中国化工学会女科技工作者委员会委员，海峡两岸气候变迁与能源可持续发展理事会常务理事等。

作为项目负责人先后承担了国家重点研发计划项目、国防科技创新特区项目、国家自然科学基金重点项目等。因在“新型绿色烯烃环氧化用催化材料的研究”、“功能复合材料的结构设计、多级构筑与性能定制研究”方面的贡献，作为第一完成人，2011 年获北京市科学技术奖二等奖，2016 年获高等学校科学研究优秀成果奖自然科学奖一等奖。