

周丹红博士 教授



联系方式:

地 址: 大连市沙河口区黄河路850号, 辽宁师范大学化学化工学院

邮 编: 116029

电 话: 0411-82158088

传 真: 0411-82156858

E-mail: dhzhou@dicp.ac.cn

## 个人情况综述

周丹红, 1962年1月出生。博士, 教授。现任辽宁师范大学特聘教授, 硕士生导师。大连理工大学兼职教授, 中国科学院大连化学物理研究所客座研究学者。“辽宁省百千万人才工程”百人层次学者。1978年至1986年在大连理工大学精细化工专业学习并获得硕士学位。1989年至1994年留学德国卡尔斯鲁尔大学, 从事物理化学专业方向研究并获得博士学位。1994年回国受聘于辽宁师范大学。2000年至2005年先后在大连化物所及美国加州大学伯克利分校作高级访问学者。主要研究领域: 理论化学计算和分子模拟计算, 目前研究重点是针对以分子筛为主的固体催化剂的微观结构及催化性能进行理论计算研究, 揭示几何结构-电子结构-功能及性质的内在规律, 探讨化学反应机理。近年来已经完成三项辽宁省教育厅科研项目, 主持一项国家自然科学基金项目。在国内外学术期刊发表论文40多篇, 其中SCI收录30多篇。三篇论文获辽宁省自然科学学术成果奖。

主要社会兼职: 民进辽宁省委员会委员, 民进大连市委委员会委员, 民进辽宁师范大学总支部主任; 沙河口区人大常委会副主任(不驻会)。

## 主要学习工作经历

- |                 |                                                         |
|-----------------|---------------------------------------------------------|
| 1978.09-1982.08 | 大连工学院化工系染料专业, 本科, 获得工学学士学位;                             |
| 1982.08-1983.08 | 天津市五一化工厂技术员;                                            |
| 1983.09-1986.05 | 大连理工大学化工学院精细化工专业, 硕士, 获得工学硕士学位; 导师杨锦宗教授(中国工程院院士);       |
| 1986.06-1989.04 | 大连大学工学院化工系, 讲师;                                         |
| 1989.05-1990.10 | 赴德国参加“第25届化学工程和物理化学国际青年教师研修班”, 在卡尔斯鲁尔大学化学系物理化学专业完成研究课题; |
| 1990.10-1993.12 | 德国卡尔斯鲁尔大学化学系物理化学专业攻读博士, 于1992年10月获得理学博士学位;              |
| 1994.02-现在      | 辽宁师范大学化学化工学院。特聘教授; 硕士生导师。                               |
| 1997.02-1997.07 | 中国科学院化学所访问学者;                                           |

## 主要研究领域

理论化学计算和分子模拟计算，针对以分子筛为主的固体催化材料、有机-金属络合物手性催化材料以及各种功能材料和功能分子的微观结构及其性能进行理论计算表征，预测反应过渡态的结构，计算活化能，研究结构与性能之间的关系。

## 教学工作

本科生基础课《仪器分析》、《仪器分析实验》、《物理化学实验》等。

研究生课程包括《分子模拟计算》、《专业英语》等。

## 主持科研项目

1. 国家自然科学基金：Mo/HZSM-5 甲烷无氧芳构化双功能催化机理的理论计算研究，（项目批准号：20773058），2008年1月-2010年12月，项目负责人。
2. 辽宁省教育厅，高等学校科学研究项目：Mo/ZSM-5催化剂上甲烷C-H键活化机理的理论研究（编号A类05L211），2006年1月-2008年6月，项目负责人。
3. 辽宁省教育厅，高等学校科学研究项目：模板剂在MCM-22分子筛合成中的作用机理研究（编号A类202122025），2002年9月-2005年9月，项目负责人。
4. 辽宁省教育厅，高等学校科学研究项目：计算机分子模拟方法用于研究有机小分子在分子筛纳米孔道中的吸附和扩散，（编号：20042093），2001年1月-2002年12月，项目负责人。
5. 国家自然科学基金：类沸石分子筛型配位聚合物的设计合成及性质研究项目（批准号：20571013），2006年1月-2008年12月，主要参加者。
6. 国家自然科学基金重点项目：模型氧化物表面担载金属纳米粒子的催化基础（No 90206036），2003年1月-2006年12月，主要参加者。

## 发表论文及专利

1. 倪丹,周丹红,张佳,应用理论计算研究MCM-22分子筛相邻酸性位上乙烯和苯的吸附,*催化学报*,2008,29(4):366-372
2. 张佳,周丹红,倪丹,H-ZSM-5分子筛上的乙烯二聚反应机理的理论计算研究,*催化学报*,2008,29(8):715-719
3. **D.H.Zhou\***, Y.Zhang, H.Y. Zhu, D. Ma, X.H. Bao, The Structure, Stability and Reactivity of Mo-oxo species in H-ZSM5 Zeolites: Density Functional Theory Study, *J. Phys. Chem. C*, 2007, 111(5); 2081-2091
4. Zhu Hongyuan, Zhang Yuan, **Zhou Danhong\***, Guan Jing, Bao Xinhe, DFT Study on the Catalytic Mechanism of Methane Activation on Molybdenum Carbide loaded on MCM-22 zeolite, *Chinese J catalysis*, 2007,28(2):180-186
5. 朱洪元, 张元, **周丹红\***, 关静, 包信和, Mo/MCM-22分子筛碳化钼活性中心结构及甲烷活化机理的密度泛函研究, *催化学报*, 2007,28(2):180-186
6. **周丹红\***, 王玉清, 贺宁, 杨刚, Cu(I), Ag(I) /分子筛化学吸附脱硫的 $\pi$ -络合机理, *物理化学学报*, 2006, 22(5): 542-547
7. **Danhong Zhou\***, Ying Bao, Mingmei Yang, Yan Wang, Xianchun Liu, Xinhe Bao, Density Functional Studies on the Brønsted Acidity of MCM-22 zeolite, *J. Mol Catal A: Chem*, 244 (2006) 11-19
8. Gang Yang, **Danhong Zhou\***, Xianchun Liu, Xiuwen Han, Xinhe Bao, Possible active sites in Fe/ZSM-5 zeolite for the direct benzene hydroxylation to phenol: 1.  $\mu$ -Oxo[Fe,M] species (M = Fe, Al), *J. Mol. Struct.*, 797(2006)131-139
9. **Danhong Zhou\***, Ning He, Yuqing Wang, Gang Yang, Xianchun Liu, Xinhe Bao, DFT Study of the Acid Strength of MCM-22 with double Si/Al Substitutions in 12MR supercage, *J. Mol. Struct.: THEOCHEM*. 756(2005)39-46

10. 鲍莹, 周丹红\*, 杨明媚, 辛长波, 武跃, MCM-22分子筛酸性的DFT理论计算研究, *无机化学学报*, 21(2005)971
11. Gang Yang, Jianqin Zhuang, Yan Wang, **Danhong Zhou**, Maoqing Yang, Xianchun Liu, Xiuwen Han, Xinhe Bao, Enhancement on the hydrothermal stability of ZSM-5 zeolites by the cooperation effect of exchanged lanthanum and phosphoric species, *J. Mol. Struct.: THEOCHEM* 737 (2005) 271–276
12. Gang Yang, Yan Wang, **Danhong Zhou**, Xianchun Liu, Xiuwen Han and Xinhe Bao, Density functional theory calculations on various M/ZSM-5 zeolites: Interaction with probe molecule H<sub>2</sub>O and relative hydrothermal stability predicted by binding energies, *J. Mol Catal A: Chem*, 237 (2005) 36-44
13. Ma D, Zhu QJ, Wu ZL, **Zhou DH**, Shu YY, Xin Q, Xu YD, Bao XH, The synergic effect between Mo species and acid sites in Mo/HMCM-22 catalysts for methane aromatization, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 7(2005)(16)3102-3109
14. 周丹红\*, 杨明媚, 王妍, 杨刚, 包信和, 模板剂与MCM-22分子筛匹配作用的分子模拟计算, *无机化学学报*, 20(2004)41-47
15. 皇艳蕾, 陈杨英, 刘秀梅, 周丹红\*, 范荫恒, 苯基改性的中孔分子筛SBA-15的合成及其磺化, *催化学报*, 5(2004) 413~416
16. Yan Wang, **Danhong Zhou**, Gang Yang, Xianchun Liu, Ding Ma, DongBa Liang, Xinhe Bao, Density Functional Theory Study of Proton Hopping in MCM-22 zeolite, *Chemical Physics letters*, 388(2004)363-366
17. Yan Wang, **Danhong Zhou**, Gang Yang, Shaojun Miao, Xianchun Liu, Ding Ma, Xinhe Bao, A DFT Study on Isomorphously Substituted MCM-22 Zeolite, *J. Phys. Chem. A*, 108(2004)6730-6734
18. Gang yang, **Danhong Zhou**, Xianchun Liu, Xinhe Bao, Density Functional Theory Study of Chemical Composition on the acidity of H-MCM-22 Zeolite, Yan Wang, *J. Phys. Chem. B*, 108(2004)(47)18228-18233
19. Yang Gang, Wang Yan, **Zhou Danhong**, Zhuang Jianqin, Liu Xianchun, Han Xiuwen, Bao Xinhe, Investigation on the Thermal Stability of La/ZSM-5 Zeolite and the La<sup>3+</sup> Species, *物理化学学报*, 20(2004)(1)60-64
20. Yan Wang, Jianqin Zhuang, Gang Yang, **Danhong Zhou**, Ding Ma, Xiuwen Han, and Xinhe Bao, Study on the external surface acidity of MCM-22 zeolite: Theoretical calculation and <sup>31</sup>P MAS NMR, *J. Phys. Chem., B*, 108(2004)1386-1391
21. **Danhong Zhou**, Ding Ma, Yan Wang, Xianchun Liu, Xinhe Bao, Study with Density Functional Theory Method on Methane C-H bond activation on the MoO<sub>2</sub>/HZSM-5 active center, *Chem. Phys Lett*, 373(2003)46-51
22. Yang Gang, Wang Yan, **Zhou DH**, Zhuang JQ, Liu XC, Han XW, Bao XH. On configuration of exchanged La<sup>3+</sup> on ZSM-5: A theoretical approach to the improvement in hydrothermal stability of La-modified ZSM-5 zeolite, *J Chem Phys*, 119(18) (2003): 9765-9770
23. 周丹红\*, 李琛, 张卫平, 刘秀梅, 韩秀文, 手性氮磷配体与钨的配位过程的研究---原位变温<sup>31</sup>P核磁及分子模拟计算, *无机化学学报*, 18(3)(2002) 238-244
24. Ma, Ding; Han, Xiuwen; **Zhou, Danhong**; Yan, Zhimin; Fu, Ruiqiang; Bao, Xinhe, Hu, Hongbing; Au-Yeung, SCF; Towards guest-zeolite interactions: An NMR spectroscopic approach, *Chemistry-A, European Journal*, 2002, Oct 4(8), 4557-4561
25. 李琛, 周丹红, 姚小泉, 刘秀梅, 陆世维, 韩秀文, 包信和, 新的钨环丙烷化催化体系的探索 ( = 2 \\* ROMAN II) : 氮磷配体立体化学结构控制顺反比选择性的初步研究, *无机化学学报*, 17(4) (2001)507-512
26. **Danhong. Zhou**, Ding. Ma, Xianchun. Liu, and Xinhe. Bao, Study with Density Functional Theory Method on Methane Dehydro-Aromatization over Mo/HZSM-5 Catalysts I: Optimization of Active Mo Species Bonded to ZSM-5 Zeolite *J Chem. Phys*, 114(2001) 9125.
27. **Danhong. Zhou**, Ding. Ma, Xianchun. Liu, and Xinhe. Bao, A Simulation Study on the Absorption of Molybdenum Species in the Channels of HZSM-5 Zeolite, *J. Mol. Catal.* 168,225(2001).
28. **Danhong Zhou\***, Y. Wu, G.M. Xu, L.J. Yang, C.L. bai, Z.Y. Tan, Molecular mechanics study of the inclusion of trimethylbenzene isomers in  $\alpha$ -cyclodextrin, *J. Inclusion Phenomena (and Macrocyclic Chemistry)*, 37 (2000)273-279

版权所有: 辽宁师范大学 功能材料化学研究所

地址: 大连市沙河口区黄河路850号, 辽宁师范大学化学化工学院功能材料研究所

邮编: 116029

联系电话: 86-411-82156989 传真: 86-411-82156858