

华工计算化学女教师樊婷： 期待发现改变命运的催化剂

100多年前，瑞典化学家贝采里乌斯误将实验室里的铂黑沾到果酒，由此发现了催化剂。催化剂是在化学反应中能改变化学反应速率而不改变化学平衡的物质，基于这种特性，催化剂在工业和制药上得到广泛应用。而通过计算化学的手段，能够在千万种催化剂中筛选出催化性能最好的一个，从而优化实验进程，进而节约时间、精力和金钱成本。这就是华南理工大学年轻的女教师樊婷十年来一直坚持的冷门小众研究。樊婷说，她一直期望有一天能够发现改变命运的催化剂。



■樊婷的办公桌与一般白领的并无两样，她在电脑上下达指令，由不远处的处理器计算结果，再根据结果调整实验方向。受访者供图

专业调剂进入化学专业 一路读到博士后

新快报记者与樊婷相约在广州市天河区龙口西的一个咖啡厅，她穿着黄色大衣，说起话来不紧不慢，笑容很甜。樊婷目前是华南理工大学的副研究员，从事计算化学方面的研究。

计算化学，对大众来说是个相对陌生的概念，樊婷用了一个通俗的比喻来说明：“从五山到龙口，有无数条路，其中有一条是最快的；在这条最快的路上，又存在一个关键节点，拖慢了整个行程。我的工作，就是找到最快的路，再在这条路上找到那个关键节点。导航地图会给你推荐行程的最佳路线。在科学研究中，我也会通过研究反应机理，来筛选出最佳反应路径。”

樊婷进入计算化学纯属巧合。“我本身对生物更感兴趣，所以高考报考专业时以生物化学方向为主。第一志愿没被录取，就分到了化学方向。”从武汉大学毕业后，樊婷到香港科技大学读硕士和博士，并最终获得计算化学博士学位。做了两年博士后，成功被华南理工大学化学与化工学院录用。

“读本科的时候，老师讲了许多经典的化学反应。在实验室里，我们就是重复这些业已成熟的反应。”忆及当年，樊婷仍然觉得神奇，“你稍微调整一下实验条件，得到的产物就完全不一样了。”

读博期间，樊婷的学习也从现象直入本质：为什么调整实验条件会发生不同的反应？她博士后期间研究的是水氧化反应。通过比较不同金属有机催化剂，实验合作者发现有一种催化剂Ru(BDA)L2，其性能明显优于其它。

“Ru(BDA)L2反应速度特别快，是同类中的佼佼者。但我们还不知道为什么它可以催化得如此之快。”谈及研究的内容，

樊婷饶有趣味地在桌子上用手画出一个曲线图，“你看，我们接下来就着力研究其中一步。当时所有人都认为这一步是决速步，其实不是，而是前一步，两个催化剂靠近的过程才是决速步。”樊婷解释说，决速步又称限速步骤，在一个机理中，其中一个基元步骤进行的速度远较其他速度慢，则该步骤决定总的反应速率。樊婷笑着说，她终于找到了拖慢整个行程的节点，取得了小小的胜利。

期待有一天 也能合成高效催化剂

不过，樊婷读博期间在理论研究上的胜利却没在找工作时给她带来更多便利。“我几乎要放弃学术研究，因为大家普遍认为计算化学只是做实验的辅助，但其实未来它完全可以成为主导。”

碰壁多次后，樊婷最终进入到华工李映伟老师的课题组。工作内容是通过理论计算的方法研究反应的反应机理，解释实验现象，同时指导实验合成高效催化剂。

走进樊婷的办公室，她的办公桌与普通白领并无二样。一个电脑屏幕、一摞材料、一些办公用品，就是工作所需的全部工具。“你可能想象不到，我们不用亲自做实验，所有的计算都是在电脑上进行，不过用到的服务器却不一样。”樊婷说。

屏幕这头，樊婷敲下指令；在不远的服务器上运行出反应结果。根据结果，樊婷再不断调整实验方向。

如今，研究、上课是樊婷的工作日常。每天，她都会从浩如烟海的文献资料里搜索新论文，找寻灵感。樊婷认为，没有催化剂的世界是难以想象的。她介绍，一般肿瘤药从开始临床试验到上市需要8年，被誉为火箭速度的药物格列卫也用了2年11

个月。工业过程中约有90%以上需要使用催化剂。

“如果能筛出一些高效催化剂，就会提高实验效率和催化性能。在医学和工业上，这是了不起的成就。领域里的大牛通过计算手段筛查合成了一些高效催化剂，大大降低了企业的成本。希望有一天我也能做到这种程度。”樊婷的目标很明确，很坚定。

“我相信一直做一件事 一定会有成果”

据悉，目前国内从事计算化学的学者很少，樊婷所在的学院仅有数名老师研究计算化学。“研究的人很少，发论文就难了。”樊婷说，即便发了论文，因为领域小众，别人引用文章的几率也就很低，那么文章的“影响因子”随之变低，这在现在的科研评判体系下处于劣势。

每当实验迟迟捕捉不到应有的反应物，探究不到机理时，樊婷也会心情郁结。这种情况下，她会一个人在黑夜奔跑，缓解压力。不过，更多时候，她没时间做这些，而是继续查文献，继续研究，这也是她的一种解压方式。“当我沉浸在某一件事情当中时，心里就会暗下决心，一定想要弄明白原理。有的实在探究不到，也只好暂时放弃这个研究。”

今年上半年，樊婷的申请研究基金之路并不顺利。入选广州市青年托举工程人才给了她极大信心。“本来以为不会入选，没想到入选了，挺开心，也挺受鼓励的。”樊婷说，感觉受到了肯定，发现自己也是优秀的，她正准备重整旗鼓积极迎接随之而来的立项。

“现在社会的氛围不太适合做科研，比别人付出多，投入不成正比。但我相信一直做一件事一定会有成果，也希望年轻人能静下心来做好一件事。”樊婷说。



樊婷

生于1988年3月，32岁，广州市科普推广协会委员。2014年毕业于香港科技大学，获得计算化学博士学位。现就职于华南理工大学化学与化工学院，从2010年起一直从事计算化学方面的研究，主要通过理论计算的方法研究反应的反应机理，解释实验现象，同时指导实验合成高效催化剂。