

批准立项年份	2009
通过验收年份	2012

教育部重点实验室年度报告

(2015 年 1 月—— 2015 年 12 月)

实验室名称：理论及计算光化学教育部重点实验室

实验室主任：方维海

实验室联系人/联系电话：高靓辉/58802003

E-mail 地址：lhgao@bnu.edu.cn

依托单位名称：北京师范大学

依托单位联系人/联系电话：

2016 年 3 月 20 日填报



填写说明

一、年度报告中各项指标只统计当年产生的数据，起止时间为1月1日至12月31日。年度报告的表格行数可据实调整，不设附件，请做好相关成果支撑材料的存档工作。年度报告经依托高校考核通过后，于次年3月31日前在实验室网站公开。

二、“**研究水平与贡献**”栏中，各项统计数据均为本年度由实验室人员在本实验室完成的重大科研成果，以及通过国内外合作研究取得的重要成果。其中：

1.“**论文与专著**”栏中，成果署名须有实验室。专著指正式出版的学术著作，不包括译著、论文集等。未正式发表的论文、专著不得统计。

2.“**奖励**”栏中，取奖项排名最靠前的实验室人员，按照其排名计算系数。系数计算方式为： $1/\text{实验室最靠前人员排名}$ 。例如：在某奖项的获奖人员中，排名最靠前的实验室人员为第一完成人，则系数为1；若排名最靠前的为第二完成人，则系数为 $1/2=0.5$ 。实验室在年度内获某项奖励多次的，系数累加计算。部委（省）级奖指部委（省）级对应国家科学技术奖相应系列奖。一个成果若获两级奖励，填报最高级者。未正式批准的奖励不统计。

3.“**承担任务研究经费**”指本年度内实验室实际到账的研究经费、运行补助费和设备更新费。

4.“**发明专利与成果转化**”栏中，某些行业批准的具有知识产权意义的国家级证书（如：新医药、新农药、新软件证书等）视同发明专利填报。国内外同内容专利不得重复统计。

5.“**标准与规范**”指参与制定国家标准、行业/地方标准的数量。

三、“**研究队伍建设**”栏中：

1.除特别说明统计年度数据外，均统计相关类型人员总数。固定人员指高等学校聘用的聘期2年以上的全职人员；流动人员指访问学者、博士后研究人员等。

2.“**40岁以下**”是指截至当年年底，不超过40周岁。

3.“**科技人才**”和“**国际学术机构任职**”栏，只统计固定人员。

4.“**国际学术机构任职**”指在国际学术组织和学术刊物任职情况。

四、“**开放与运行管理**”栏中：

1.“**承办学术会议**”包括国际学术会议和国内学术会议。其中，国内学术会议是指由主管部门或全国性一级学会批准的学术会议。

2.“**国际合作项目**”包括实验室承担的自然科学基金委、科技部、外专局等部门主管的国际科技合作项目，参与的国际重大科技合作计划/工程

(如: ITER、CERN等)项目研究,以及双方单位之间正式签订协议书的国际合作项目。

一、简表

实验室名称		理论及计算光化学教育部重点实验室				
研究方向 (据实增删)		研究方向 1	激发态电子结构和性质			
		研究方向 2	多维体系量子动力学			
		研究方向 3	生物发光理论与计算			
		研究方向 4	化学活性小分子识别			
		研究方向 5	光电功能材料			
实验室主任	姓名	方维海	研究方向	激发态电子结构和性质		
	出生日期	1950 年 12 月 22 日	职称	教授	任职时间	2009 年
实验室副主任 (据实增删)	姓名		研究方向			
	出生日期		职称		任职时间	
学术委员会主任	姓名	姚建年	研究方向	材料光化学		
	出生日期		职称	研究员	任职时间	2009 年
研究水平 与贡献	论文与专著	发表论文	SCI	62 篇	EI	0 篇
		科技专著	国内出版	0 部	国外出版	0 部
	奖励	国家自然科学奖	一等奖	0 项	二等奖	0 项
		国家技术发明奖	一等奖	0 项	二等奖	0 项
		国家科学技术进步奖	一等奖	0 项	二等奖	0 项
		省、部级科技奖励	一等奖	0 项	二等奖	0 项
	项目到账总经费	2100 万元	纵向经费	1900 万元	横向经费	200 万元
	发明专利与成果转化	发明专利	申请数	12 项	授权数	4 项
		成果转化	转化数	0 项	转化总经费	0 万元
	标准与规范	国家标准		0 项	行业/地方标准	0 项

研究队伍 建设	科技人才	实验室固定人员	43 人	实验室流动人员	3 人	
		院士	1 人	千人计划	长期 2 人 短期 1 人	
		长江学者	特聘 2 人 讲座 1 人	国家杰出青年基金	9 人	
		青年长江	0 人	国家优秀青年基金	2 人	
		青年千人计划	2 人	其他国家、省部级 人才计划	5 人	
		自然科学基金委创新群体	1 个	科技部重点领域创新团队	0 个	
	国际学术 机构任职 (据实增删)	姓名	任职机构或组织		职务	
	访问学者	国内	1 人	国外	1 人	
博士后	本年度进站博士后	1 人	本年度出站博士后	0 人		
学科发展 与人才培 养	依托学科 (据实增删)	学科 1	物理化学	学科 2	学科 3	
	研究生培养	在读博士生		60 人	在读硕士生	40 人
	承担本科课程	2800 学时		承担研究生课程	1200 学时	
	大专院校教材	3 部				
开放与 运行管理	承办学术会议	国际	1 次	国内 (含港澳台)	0 次	
	年度新增国际合作项目			1 项		
	实验室面积	800 M ²	实验室网址	http://www.chem.bnu.edu.cn/zdsys/llyjsgghjybzdsys/		
	主管部门年度经费投入	(直属高校不填)万元	依托单位年度经费投入	250 万元		

二、研究水平与贡献

1、主要研究成果与贡献

结合研究方向，简要概述本年度实验室取得的重要研究成果与进展，包括论文和专著、标准和规范、发明专利、仪器研发方法创新、政策咨询、基础性工作等。总结实验室对国家战略需求、地方经济社会发展、行业产业科技创新的贡献，以及产生的社会影响和效益。

2015年，围绕实验室的建设目标，在科研方面取得了如下进展：（1）发展了量子-经典混合的非绝热动力学方法，在精确从头算的水平上，实现了on-the-fly数值模拟，并用以解决N₂O分子光解离的机理问题；（2）拓展了量子/经典（QM/MM）力学和动力学方法，解决了光化学和光生物的基础科学问题，系统研究了偶氮苯光异构触发的FK-11多肽折叠和解折叠过程和光诱导环加成反应的对映选择性；（3）阐明绿色荧光蛋白（GFP）的激发态、光异构和失活途径，为设计优异的GFP荧光标记物提供了理论基础；（4）理论计算了水母荧光蛋白发光的整个化学过程，特别明确指出化学激发态、生物荧光态和光激发态的区别，此项研究成果被同行列为该领域研究的重要事件之一；（5）完成复杂体系如芳香刚性大环组装体的晶体结构自组装过程的电子结构计算，用粗粒化耗散粒子动力学模拟了脂筏、人体胰岛淀粉样多肽和生物膜的组装，为药物设计提供了重要理论基础。

以分子结构和光化学反应为对象，以探索结构和反应性的溶剂、界面及蛋白环境效应为纽带，实验室在复杂环境中分子的电子结构和动力学过程方面做了卓有成效的研究工作，并发展和改进了诸多电子结构理论和动力学方法，搭建起理论化学计算模拟平台，推动了理论化学的发展，使我们在国际理论化学界占有一席之地。

2、承担科研任务

概述实验室本年度科研任务总体情况。

新立科研项目8项，批准经费2100万元；在研项目30项，到位经费约5000万元；固定人员43人，人均科研经费约30万元/年。

请选择本年度内主要重点任务填写以下信息:

序号	项目/课题名称	编号	负责人	起止时间	经费(万元)	类别
1	溶液、界面及蛋白微环境中分子结构与化学反应的理论方法和计算模拟	2011CB808503	方维海	2011.1-2015.12	2400	973 计划
1	溶液及核酸环境中分子光化学反应机理的理论计算模拟和 Raman 光谱研究	21033002	方维海	2011.1-2015.12	240	重点项目
3	多功能调控蛋白 AceK 的磷酸酶反应机制及调控的物理化学研究与应用	21133003	贾宗超	2012.1-2016.12	320	重点项目
4	理论及计算光化学	21421003	邵久书	2015.1-2020.12	1200	创新研究群体计划
5	生物发光的理论研究	21325312	刘亚军	2014.1-2017.12	400	杰出青年基金

注: 请依次以国家重大科技专项、“973”计划(973)、“863”计划(863)、国家自然科学基金(面上、重点和重大、创新研究群体计划、杰出青年基金、重大科研计划)、国家科技(攻关)、国防重大、国际合作、省部重大科技计划、重大横向合作等为序填写,并在类别栏中注明。只统计项目/课题负责人是实验室人员的任务信息。只填写所牵头负责的项目或课题。若该项目或课题为某项目的子课题或子任务,请在名称后加*号标注。

三、研究队伍建设

1、各研究方向及研究队伍

研究方向	学术带头人	主要骨干
1. 激发态电子结构和性质	方维海	陈雪波、高靓辉、崔刚龙
2. 多维体系量子动力学	邵久书	夏珂, 李新奇
3. 生物发光理论与计算	刘亚军	丁万见、朱嘉、方道
4. 化学活性小分子识别	陈光巨	方德彩、贾宗超、王艳
5. 光电功能材料	薄志山	江华、杨清正、陈玲

2.本年度固定人员情况

序号	姓名	类型	性别	学位	职称	年龄	在实验室工作年限
1	方维海	研究人员	男	博士	教授		5年
2	成莹	研究人员	女	博士	教授		5年
3	邵久书	研究人员	男	博士	教授		5年
4	范楼珍	研究人员	女	博士	教授		5年
5	方德彩	研究人员	男	博士	教授		5年
6	王艳	研究人员	女	博士	教授		5年
7	陈光巨	研究人员	男	博士	教授		5年
8	李新奇	研究人员	男	博士	教授		5年
9	夏珂	研究人员	男	博士	教授		5年
10	薄志山	研究人员	男	博士	教授		5年
11	汪辉亮	研究人员	男	博士	教授		5年
12	杨清正	研究人员	男	博士	教授		5年
13	欧阳津	研究人员	男	博士	教授		5年
14	贾宗超	研究人员	男	博士	教授		5年
15	江华	研究人员	男	博士	教授		5年
16	郑积敏	研究人员	男	博士	教授		5年
17	祖莉莉	研究人员	女	博士	教授		5年
18	杨国建	研究人员	男	博士	教授		5年
19	黄元河	研究人员	男	博士	教授		5年
20	胡劲波	研究人员	男	博士	教授		5年
21	卢忠林	研究人员	男	博士	教授		5年
22	侯国华	研究人员	男	博士	副教授		5年
23	刘亚军	研究人员	男	博士	教授		5年
24	自国甫	研究人员	男	博士	教授		5年
025	高靓辉	研究人员	女	博士	教授		5年
26	李晓红	研究人员	女	博士	教授		5年
27	陈雪波	研究人员	男	博士	教授		5年

序号	姓名	类型	性别	学位	职称	年龄	在实验室工作年限
28	丁万见	研究人员	女	博士	副教授		5年
29	谭宏伟	研究人员	男	博士	副教授		5年
30	朱嘉	研究人员	男	博士	副教授		5年
31	那娜	研究人员	女	博士	教授		5年
32	李敏峰	研究人员	男	博士	副教授		5年
33	焦鹏	研究人员	男	博士	副教授		5年
34	秦卫东	研究人员	男	博士	教授		5年
35	刘红云	研究人员	女	博士	副教授		5年
36	崔刚龙	研究人员	男	博士	教授		5年
37	苏红梅	研究人员	女	博士	教授		5年
38	龙润	研究人员	男	博士	教授		5年
39	陈玲	研究人员	女	博士	教授		5年
40	吴立明	研究人员	男	博士	教授		5年
41	方道	研究人员	男	博士	副教授		5年
42	韩娟	技术人员	女	博士	工程师		5年
43	张媛	技术人员	女	博士	工程师		5年

注：（1）固定人员包括研究人员、技术人员、管理人员三种类型，应为所在高等学校聘用的聘期2年以上的全职人员。（2）“在实验室工作年限”栏中填写实验室工作的聘期。

3、本年度流动人员情况

序号	姓名	类型	性别	年龄	职称	国别	工作单位	在实验室工作期限
1	刘丽虹	博后	女			中国	北京师范大学	12月
2	王浩斌	访问学者	男		教授	美国	University of Colorado Denver	3月
3	吉琳	访问学者	女		副教授	中国	首都师范大学	6月

注：（1）流动人员包括“博士后研究人员、访问学者、其他”三种类型，请按照以上三种类型进行人员排序。（2）在“实验室工作期限”在实验室工作的协议起止时间。

四、学科发展与人才培养

1、学科发展

简述实验室所依托学科的年度发展情况，包括科学研究对学科建设的支撑作用，以及推动学科交叉与新兴学科建设的情况。

实验室依托于北京师范大学化学学院，本年度协助学院搭建了理论计算模拟和谱学分析测量平台，通过自己培养、国内外引进和学科交叉融合，汇集了一大批优秀的中青年骨干，在发展新的理论化学方法和相应的计算手段方面获得原创性强、有重要国际影响的研究成果，解决了溶液光化学、金属表面催化反应、DNA光损伤和光修复、蛋白酶的结构和反应性等一系列化学、材料和生命科学的学科交叉问题。实验室的发展大大提升了北京师范大学化学学院在国内、国际上的影响力，使我们的理论化学的整体研究水平处于国际前列。

2、科教融合推动教学发展

简要介绍实验室人员承担依托单位教学任务情况，主要包括开设主讲课程、编写教材、教改项目、教学成果等，以及将本领域前沿研究情况、实验室科研成果转化为教学资源的情况。

实验室固定人员每人承担两门以上本科和研究生课程，涵盖无机、有机、高分子、物化所有化学学科的重要课程，编写教材3部以上，承担多项教改项目。实验室利用现有实验条件和计算资源为研究生开设现代化学设计实验课程，充分将科研成果转化为教学资源。

3、人才培养

(1) 人才培养总体情况

简述实验室人才培养的代表性举措和效果，包括跨学科、跨院系的人才交流和培养，与国内、国际科研机构或企业联合培养创新人才等。

本年度实验室近20名博士研究生获得学位，10余名研究生获得硕士学位，多名研究生为跨物理系和化学学院联合培养。得益于实验室的培养和支持，一位成员成长为国家自然科学基金委杰出青年基金获得者，一位获得自然科学基金委“优秀青年科学基金”资助，引进两位杰出青年基金获得者。

(2) 研究生代表性成果 (列举不超过 3 项)

简述研究生在实验室平台的锻炼中, 取得的代表性科研成果, 包括高水平论文发表、国际学术会议大会发言、挑战杯获奖、国际竞赛获奖等。

1、B. Xie, L. Liu, G. Cui, W-H. Fang, J. Cao, X. Li, *J. Chem. Phys.* 2015, 143, 194107.

2、H. Wang, X. Cao, X. Chen, W-H. Fang, and M. Dolg, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2015, 54, 14295 – 14298.

3、S. Xia, X. G. Cui, W-H. Fang, and W. Thiel, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 55, 2067 – 2072.

(3) 研究生参加国际会议情况 (列举 5 项以内)

序号	参加会议形式	学生姓名	硕士/博士	参加会议名称及会议主办方	导师
1	墙报	王红娟		15 届国际量子化学会议	方维海
2	墙报	丁博文		15 届国际量子化学会议	刘亚军
3	墙报	杨文静		15 届国际量子化学会议	陈雪波

注: 请依次以参加会议形式为大会发言、口头报告、发表会议论文、其他为序分别填报。
所有研究生的导师必须是实验室固定研究人员。

五、开放交流与运行管理

1、开放交流

(1) 开放课题设置情况

简述实验室在本年度内设置开放课题概况。

本年度实验室继续开放 2013 年和 2014 年设置的开放的 5 个课题:

- (1) Rh(II) 催化 O-H、C-H 及 N-H 键的反应机理研究;
- (2) Cu (I) 不对称催化 O-H 和 N-H 键的反应机理;
- (3) Ni (0) 催化 CO₂ 还原机理的理论研究
- (4) pH 调控 Pd 电极表面甲醇氧化反应机理的周期性密度泛函理论理论研究;
- (5) Pd 电极表面甲酸燃料电池中毒机制的理论研究。

并增设了一个新课题:

- (6) “气溶胶的多尺度动力学研究”。

序号	课题名称	经费额度	承担人	职称	承担人单位	课题起止时间
1	气溶胶的多尺度动力学研究	2 万	吉琳	副教授	首都师范大学	2014. 9-2015. 9

注: 职称一栏, 请在职人员填写职称, 学生填写博士/硕士。

(2) 主办或承办大型学术会议情况

序号	会议名称	主办单位名称	会议主席	召开时间	参加人数	类别
1	生物发光国际研讨会	北京师范大学	刘亚军	2015年9月11-13日	40	全球性

注：请按全球性、地区性、双边性、全国性等类别排序，并在类别栏中注明。

(3) 国内外学术交流与合作情况

请列出实验室在本年度内参加国内外学术交流与合作的概况，包括与国外研究机构共建实验室、承担重大国际合作项目或机构建设、参与国际重大科研计划、在国际重要学术会议做特邀报告的情况。请按国内合作与国际合作分类填写。

1. 方维海教授、陈雪波教授与德国科隆大学合作共建实验室。
2. 方维海教授、崔刚龙教授与德国马普研究所合作承担重大国际合作项目。
3. 方维海教授应邀参加 2015 年第 15 届国际量子化学会议做大会报告，地点：北京，时间：Jun. 8-13。
4. 实验室成员参加国内、国际会议并做口头报告人均超过 1 次。

(4) 科学传播

简述实验室本年度在科学传播方面的举措和效果。

以实验室为依托多次召开小型研讨会，邀请与会人员参观实验室；邀请专家做学术报告并参观实验室；设立实验室开放日，为本科生和中学生介绍实验室；举办大学生夏令营和研究生暑期学校；随时更新实验室网站。

2、运行管理

(1) 学术委员会成员

序号	姓名	性别	职称	年龄	所在单位	是否外籍
1	姚建年	男	教授		中科院化学所	否
2	帅志刚	男	教授		清华大学	否
3	刘文剑	男	教授		北京大学	否
4	刘智攀	男	教授		复旦大学	否
5	谢代前	男	教授		南京大学	否
6	黎书华	男	教授		南京大学	否

7	张东辉	男	教授		中科院大化所	否
8	杨金龙	男	教授		中国科技大学	否
9	吴 玮	男	教授		厦门大学	否
10	吴骊珠	女	教授		中科院理化所	否
11	邵久书	男	教授		北京师范大学	否
12	成 莹	女	教授		北京师范大学	否
13	李新奇	男	教授		北京师范大学	否
14	崔宗杰	男	教授		北京师范大学	否
15	方维海	男	教授		北京师范大学	否

(2) 学术委员会工作情况

请简要介绍本年度召开的学术委员会情况，包括召开时间、地点、出席人员、缺席人员，以及会议纪要。

2015年10月15日下午学术委员会全体委员在北京师范大学化学学院举行学术委员会会议，会议认真总结了2015年的科研和管理工作的情况，对实验室在以大学为依托、培养高水平人才方面所做的工作给予了充分肯定，同时会议也对实验室今后的发展和建设提出了具体的意见和建议，指出理论与计算方法的结合仍需进一步加强，使理论能够更好地通过计算的桥梁解决实际化学问题；各研究方向应进一步加强交叉融合、特别应与实验紧密结合；高素质研究生和博士后人才队伍建设还有待提高。

(3) 主管部门和依托单位支持情况

简述主管部门和依托单位本年度为实验室提供实验室建设和基本运行经费、相对集中的科研场所和仪器设备等条件保障的情况，在学科建设、人才引进、团队建设、研究生培养指标、自主选题研究等方面给予优先支持的情况。

北京师范大学为实验室仪器购置提供了一定经费资助，在人才引进、团队建设、自主选题研究等方面给予了优先支持，但研究生培养指标未给予优先支持。

3、仪器设备

简述本年度实验室大型仪器设备的使用、开放共享情况，研制新设备和升级改造旧设备等方面的情况。

实验室大型设备对全院开放，购置了两台大型仪器，更新了 512 个节点的计算集群。

六、审核意见

1、实验室负责人意见

实验室承诺所填内容属实，数据准确可靠。

数据审核人：朱嘉
实验室主任：[Signature]
(单位公章)
2016年 3月 20日

2、依托高校意见

依托单位年度考核意见：

(需明确是否通过本年度考核，并提及下一步对实验室的支持。)

实验室通过年度考核。我校将继续按照主管部门要求，加大各类资源投入力度，支持重点实验室建设和发展。

依托单位负责人签字：[Signature]
(单位公章)
年 月 日