

|        |      |
|--------|------|
| 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

(2022年01月01日--2022年12月31日)

**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：**刘丽虹/ 13426196786

**E-mail地址：**lihong.liu@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：**戴杰/010-58807921

2023年11月15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根据实调整，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<br>(据实增删)                       |           | 研究方<br>向1        | 光诱导化学及生物过程的多尺度动力学模拟 |                              |      |         |
|                                      |           | 研究方<br>向2        | 计算模拟辅助的发光材料设计和性能探测  |                              |      |         |
|                                      |           | 研究方<br>向3        | 光化学反应及光生物过程的电子结构计算  |                              |      |         |
|                                      |           | 研究方<br>向4        | 量子计算                |                              |      |         |
| 实验<br>室<br>主<br>任                    | 姓名        | 方维海              | 研究方<br>向            | 理论光化学                        |      |         |
|                                      | 出生日期      | 1955-12          | 职称                  | 正高级                          | 任职时间 | 2009-01 |
| 实验<br>室<br>副<br>主<br>任<br>(据实<br>增删) | 姓名        | 崔刚龙              | 研究方<br>向            | 理论及计算光化学                     |      |         |
|                                      | 出生日期      | 1981-12          | 职称                  | 正高级                          | 任职时间 | 2015-01 |
| 学术<br>委员<br>会<br>主<br>任              | 姓名        | 张东辉              | 研究方<br>向            | 气相反应动力学；复杂体系的量子动力学；高精度势能面的构造 |      |         |
|                                      | 出生日期      | 1967-01          | 职称                  | 正高级                          | 任职时间 | 2015-01 |
| 研究<br>水平<br>与<br>贡<br>献              | 论文与专<br>著 | 发表高<br>水平论<br>文  | 62 篇                | 国内论文                         |      | 5 篇     |
|                                      |           | 科技专<br>著         | 国内出<br>版            | 0部                           | 国外出版 | 0部      |
|                                      | 奖励        | 国家自<br>然科学<br>奖  | 一等奖                 | 0 项                          | 二等奖  | 0 项     |
|                                      |           | 国家技<br>术发明<br>奖  | 一等奖                 | 0 项                          | 二等奖  | 0 项     |
|                                      |           | 国家科              | 一等奖                 | 0 项                          | 二等奖  | 0 项     |
|                                      |           |                  |                     |                              |      |         |

|                |                            |                  |          |                                                           |          |               |
|----------------|----------------------------|------------------|----------|-----------------------------------------------------------|----------|---------------|
|                |                            | 学技术<br>进步奖       |          |                                                           |          |               |
|                |                            | 省、部<br>级科技<br>奖励 | 一等奖      | 0 项                                                       | 二等奖      | 0 项           |
|                | 项目到账<br>总经费                | 2893万<br>元       | 纵向经<br>费 | 2393万元                                                    | 横向经费     | 500万元         |
|                | 发明专利<br>与成果转<br>化          | 发明专<br>利         | 申请数      | 12 项                                                      | 授权数      | 10 项          |
|                |                            | 成果转<br>化         | 转化数      | 0 项                                                       | 转化总经费    | 0 万元          |
|                | 标准与规<br>范                  | 国家标<br>准         | 0 项      |                                                           | 行业/地方标准  | 0 项           |
| 研究<br>队伍<br>建设 | 科技人才                       | 实验室固定人员          |          | 35人                                                       | 实验室流动人员  | 4人            |
|                |                            | 院士               |          | 1人                                                        | 国家高层次人才  | 16人（新增<br>1人） |
|                |                            | 国家青年人才           |          | 9人（新增1人）                                                  | 省部级人才    | 0人（新增<br>0人）  |
|                | 国际学术<br>机构任职<br>(据实增<br>删) | 姓名               |          | 任职机构或组织                                                   |          | 职务            |
|                |                            | 方维海              |          | 亚太理论化学联合会                                                 |          | 终生会士          |
|                |                            | 方维海              |          | 《分子科学》杂志                                                  |          | 主编            |
|                |                            | 龙闰               |          | J. Phys. Chem. Lett                                       |          | 副主编           |
|                |                            | 陈玲               |          | 美国化学会Crystal Growth and Design                            |          | 副主编           |
|                |                            | 陈玲               |          | Inorg. Chem. 、 J Soild State Chem.<br>Inorg. Chem. Front. |          | 编委            |
|                |                            | 苏红梅              |          | J. Phys. Chem. A/B/C/Lett.                                |          | 编委            |
|                |                            | 方维海              |          | Int. J. Quan. Chem. 和J. Phys. Chem                        |          | 编委            |
|                |                            | 范楼珍              |          | 美国电化学会/材料化学会/国际电化学会                                       |          | 委员            |
|                | 访问学者                       | 国内               |          | 0 人                                                       | 国外       | 0 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<br>发展<br>与人 | 依托学科<br><br>(据实增<br>删)     | 学科1              | 物理化<br>学 | 学科<br>2                                                   |          | 学科3           |

|                |            |                       |             |                                                                                                                     |              |        |
|----------------|------------|-----------------------|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|--------|
| 人才培养           | 研究生培养      | 在读博士生                 | 92人         | 在读硕士生                                                                                                               |              | 99人    |
|                | 承担本科课程     | 1800 学时               |             | 承担研究生课程                                                                                                             |              | 900 学时 |
|                | 大专院校教材     | 2 部                   |             |                                                                                                                     |              |        |
| 开放与运行管理        | 承办学术会议     | 国际                    | 0 次         | 国内<br>(含港澳台)                                                                                                        | 0 次          |        |
|                | 年度新增国际合作项目 |                       |             | 国际合作计划                                                                                                              |              | 0 项    |
|                | 实验室面积      | 800 M <sup>2</sup>    | 实验室网址       | <a href="http://www.chem.bnu.edu.cn/zdsys/1lyjsghxjybzdsys/">http://www.chem.bnu.edu.cn/zdsys/1lyjsghxjybzdsys/</a> |              |        |
|                | 主管部门年度经费投入 | (教育部直属高校不填)<br>null万元 | 依托单位年度经费投入  |                                                                                                                     | 1300万元       |        |
|                | 学术委员会人数    | 15 人                  | 其中外籍委员      | 0 人                                                                                                                 | 共计召开实验室学术委员会 | 1 次    |
| 是否出现学术不端行为     |            | 否                     | 是否按期进行年度考核  |                                                                                                                     | 是            |        |
| 是否每年有固定的开放日    |            | 是                     | 开放日期        |                                                                                                                     | 2022-09-15   |        |
| 开放日累计向社会开放共计   |            | 1天                    | 科普宣讲，累计参与公众 |                                                                                                                     | 500 人次       |        |
| 科普文章，累计发表科普类文章 |            | 0篇                    | 其他          |                                                                                                                     | 无            |        |

## 二、研究水平与贡献

### 1、主要研究成果与贡献

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>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。</p> <p>围绕“理论及计算光化学”的主要研究内容，发展和改进激发态电子结构、量子、经典及其混合的非绝热动力学方法，解决光化学、光生物和功能材料光响应及随后过程的基本科学问题，2022年重点实验室进展如下：</p> <p>1. 采用高精度电子结构计算方法发现了热激活延迟荧光(TADF)的新机理，有望改进纯有机TADF材料的</p> |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

设计原则。芳香硫酮具有独特的光物理性质，如来自S2态的荧光（违反Kasha规则）、S1态的热激活延迟荧光(TADF)、以及T1态的室温磷光，因而成为探索分子光化学基本过程和一般规律的模型分子体系，且已成为众多实验研究的主题。然而，有关芳香硫酮光物理特性的理论研究少见报道。我们应用多态完全活化空间自洽场二级微扰理论（MS-CASPT2）方法，探究了芳香硫酮激发态依赖的分子内氢键相互作用，及其对光物理性质的影响。发现S2和S1态氢键性质的本质差异，导致S2→S1内转换成为超快过程，使得芳香硫酮的强荧光消失。同时发现芳香硫酮S1、T2和T1态简并特性起源于激发态依赖的分子内氢键相互作用。在这种情况下，T2态起到了桥梁作用，使正向S1→T1和逆向T1→S1系间窜跃，可在亚皮秒时间尺度内完成，从而导致芳香族硫酮具有TADF。

2. 采用组合含时密度泛函理论和非绝热分子动力学，系统研究了正交相、四方相和立方相MAPbI3在相变温度下的非辐射电子-空穴复合（对应162K下的正交相、四方相体系和315K下的四方相和立方相体系）。研究发现，高温相结构紊乱诱导电荷局域化增强，非绝热耦合减小，因而，载流子寿命延长；并进一步指出热涨落和相变引起的结构紊乱与缺陷引起的结构紊乱对载流子寿命影响相当，由此揭示了热无序对载流子动力学的重要作用。此外，采用组合含时密度泛函理论和非绝热分子动力学，研究了碱土金属对钙钛矿中O2和O2-的钝化效果及其对钙钛矿载流子动力学的影响。O2在MAPbI3禁带中产生两个深能级电子俘获态，O2-使其中一个电子俘获态转变为空穴俘获态，形成一堆电子-空穴俘获态，我们称之为“超级俘获态”。当碱土金属原子(Mg、Ca、Sr、Ba)钝化O2和O2-后，确实打断了O-O键，将原始O-O键的高能量反键轨道转化为低能量的单原子O-2p轨道，将氧元素引入的缺陷态移动到价带内。

3. 我们将机器学习技术与激发态电子结构计算、非绝热动力学深度融合，选定两类光电功能材料：倍频晶体材料和OLED显示材料，针对其理论设计开展了系统深入的研究，并与实验化学家广泛合作，初步形成了理论预测在先、实验验证在后、高效筛选与精准计算交叉推进的材料研发范式，取得了一些开创性成果，引领了学科发展，也为解决国家重大需求作出了贡献。

4. 在量子计算方面，团队发展了一种实用的变分子量子响应(VQR)算法。模拟分子的响应特性对于解释实验光谱和加速材料设计至关重要，但一直是经典计算面临的重大挑战。我们发展的VQR算法，避免了对深度量子电路的需求，在超导量子处理器上首次实现了分子吸收光谱的量子计算。VQR算法的独特之处在于：它能够直接在感兴趣的频率区域内计算线性响应特性，不同频率区域的计算是完全独立的，容易实现并行计算；作为一种模拟激发光谱的方法，VQR算法不仅能给出谱峰的位置，而且提供相对的跃迁强度；响应函数的经典计算涉及所有可能的激发态求和，难以解决实际问题，而VQR算法隐含了求和，仅需计算辅助响应态的平均值，很容易实现，尤其是态密度大的频率区域，VQR算法更具优势。

## 2、承担科研任务情况

概述实验室本年度科研任务总体情况。

在2022年度实验室共承担纵向和横向课题20余项，其中包括，主持的基金委重点项目、重大项目课题和重点国际合作项目、面上和培育以及参与的重点项目、“杰青”和“优青”人才类项目等。作为4个单位之一，2016年实验室参与主持的基金委“动态化学前沿研究”科学中心项目，前5年资助经费为2000万元。实验室总体定位在基础科学前沿领域，主持自然科学基金项目的能力，在一定程度上反映了实验室基础研究的实力和水平。2022年开始被批准继续资助5年，总经费1000万元。在长期、稳定国际交流合作的基础上，实验室还是国家外专局批准的“理论及计算光化学”创新引智基地（批准经费450万元

），并且于2021年通过了科技部引智基地的验收。

此外，除了学校提供的日常运行经费50万元/年，实验室还获得了学校重点基地培育经费200万元/年和学校批准的“理论和应用光化学”交叉平台项目经费1000万元/年。烟台开发区、显华有限公司和北京师范大学共建了“烟台京师材料基因组工程研究院究院”，一期经费为1亿元，按照协议其中的15%将划拨到我校，支持我们实验室的相关基础研究。

请选择本年度内主要重点任务（10项以内）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  | 动态化学前沿研究                        | 22288201       | 方维海 | 2022-04-01--2026-12-31 | 1000   | 国家自然科学基金 |
| 2  | f区金属配合物发光和光催化理论研究               | 22120102005    | 陈雪波 | 2022-01-01--2026-12-31 | 260    | 国际合作     |
| 3  | 全原子分子动力学模拟程 序在原型系统上的测试和实际应用     | 2019YFA0709430 | 申林  | 2020-06-01--2025-05-31 | 290    | 国家重点研发计划 |
| 4  | 飞秒时间分辨红外吸收光 谱装置（紫外激发-宽带红 外探测）研制 | 21727803       | 苏红梅 | 2018-01-01--2022-12-31 | 450    | 国家自然科学基金 |
| 5  | 理论和计算光化学                        | 21725303       | 陈雪波 | 2018-01-01--2022-12-31 | 350    | 国家自然科学基金 |
| 6  | 构效关系导向的数据挖掘算法开发应用及催化性能机器学习预测    | 2021YFA1500703 | 崔刚龙 | 2022-01-01--2026-12-31 | 636    | 国家重点研发计划 |
| 7  | 基于机器学习的无机倍频 材料基因挖掘与理论设计         | 22193041       | 申林  | 2022-01-01--2026-03-31 | 375    | 国家自然科学基金 |

注：请依次以国家创新2030-重大项目、国家重点研发计划、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非涉密项目或课题。

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 |
|------|-------|------|
|------|-------|------|

|                     |     |                    |
|---------------------|-----|--------------------|
| 光诱导化学及生物过程的多尺度动力学模拟 | 方维海 | 崔刚龙、刘亚军、龙闰、高靓辉、刘丽虹 |
| 计算模拟辅助的发光材料设计和性能探测  | 陈雪波 | 崔刚龙、龙闰、申林、陈玲、吴立明   |
| 光化学反应及光生物过程的电子结构计算  | 崔刚龙 | 刘亚军、申林、李振东、刘丽虹     |
| 量子计算                | 李振东 | 方维海、李晨阳、任家俊、朱重钦    |

## 2、本年度固定人员情况

| 序号 | 姓名  | 类型   | 性别 | 学位 | 职称  | 出生年月    |
|----|-----|------|----|----|-----|---------|
| 1  | 方维海 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1955-12 |
| 2  | 崔刚龙 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1981-12 |
| 3  | 邵久书 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1965-08 |
| 4  | 陈雪波 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1972-06 |
| 5  | 刘亚军 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1969-10 |
| 6  | 苏红梅 | 研究人员 | 女  | 博士 | 正高级 | 1970-05 |
| 7  | 杨清正 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1976-08 |
| 8  | 陈玲  | 研究人员 | 女  | 博士 | 正高级 | 1972-11 |
| 9  | 那娜  | 研究人员 | 女  | 博士 | 正高级 | 1980-03 |
| 10 | 龙闰  | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1979-12 |
| 11 | 申林  | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1984-05 |
| 12 | 宛岩  | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1981-08 |
| 13 | 朱重钦 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1988-01 |
| 14 | 李晨阳 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1990-08 |
| 15 | 任佳俊 | 研究人员 | 男  | 博士 | 副高级 | 1991-08 |
| 16 | 刘楠  | 研究人员 | 女  | 博士 | 正高级 | 1984-08 |
| 17 | 陈光巨 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1957-04 |
| 18 | 方德彩 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1964-12 |
| 19 | 高靓辉 | 研究人员 | 女  | 博士 | 正高级 | 1972-03 |
| 20 | 范楼珍 | 研究人员 | 女  | 博士 | 正高级 | 1964-07 |
| 21 | 李运超 | 研究人员 | 男  | 博士 | 正高级 | 1975-02 |
| 22 | 李晓宏 | 研究人员 | 女  | 博士 | 正高级 | 1973-08 |

|    |     |      |   |    |     |         |
|----|-----|------|---|----|-----|---------|
| 23 | 刘颖  | 研究人员 | 女 | 博士 | 正高级 | 1972-08 |
| 24 | 祖莉莉 | 研究人员 | 女 | 博士 | 正高级 | 1967-12 |
| 25 | 吴立明 | 研究人员 | 男 | 博士 | 正高级 | 1973-11 |
| 26 | 李振东 | 研究人员 | 男 | 博士 | 正高级 | 1987-06 |
| 27 | 郭静  | 研究人员 | 女 | 博士 | 正高级 | 1987-04 |
| 28 | 李熙琛 | 研究人员 | 男 | 博士 | 副高级 | 1984-05 |
| 29 | 丁万见 | 研究人员 | 女 | 博士 | 副高级 | 1975-02 |
| 30 | 谭宏伟 | 研究人员 | 男 | 博士 | 副高级 | 1975-08 |
| 31 | 朱嘉  | 研究人员 | 男 | 博士 | 副高级 | 1975-12 |
| 32 | 刘丽虹 | 研究人员 | 女 | 博士 | 副高级 | 1987-08 |
| 33 | 方遒  | 研究人员 | 男 | 博士 | 副高级 | 1983-09 |
| 34 | 张媛  | 技术人员 | 女 | 博士 | 正高级 | 1978-08 |
| 35 | 韩娟  | 技术人员 | 女 | 博士 | 副高级 | 1984-04 |

注：（1）固定人员包括教学科研人员、专职研究人员、技术人员、管理人员四种类型，应为所在高等学校聘用的聘期2年以上的全职人员。

### 3、本年度流动人员情况

| 序号 | 姓名  | 类型 | 性别 | 出生日期    | 职称 | 国别 | 工作单位   |
|----|-----|----|----|---------|----|----|--------|
| 1  | 张琳  |    | 女  | 1991-11 | 中级 | 中国 | 北京师范大学 |
| 2  | 蔡肖夏 |    | 男  | 1990-08 | 中级 | 中国 | 北京师范大学 |
| 3  | 谢文菁 |    | 女  | 1991-08 | 中级 | 中国 | 北京师范大学 |
| 4  | 董磊  |    | 男  | 1991-05 | 中级 | 中国 | 北京师范大学 |

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”指流动人员本年度工作的月数。

## 四、学科发展与人才培养

### 1、学科发展建设情况

|                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>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。</p> <p>重点实验室依托的北京师范大学化学学科，具有百余年辉煌的历史，曾培养和造就了一大批杰出的学者，许多著名的化学家和教育家先后在此学习或任教。经过多年的创新发展，化学学科已经形成一个学科分布合理、富有特色的教学和科研体系，取得了丰硕的教学、科研成果，为祖国的建设和发展培养了大批优秀人才，已成为实力雄厚、在我国具有重要影响的化学教育和研究机构，是我国培养高水平化学教育和科研人才的重要基地。</p> |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

长期以来，理论及计算光化学是北京师范大学化学学科的优势和特色方向，在化学学科的发展中起到了关键作用。首先重点实验室汇集了一批以“院士”、“长江”、“杰青”、“优青”和“青干”为核心的研究队伍，为教学和科研提供了保障，提升化学学科的整体实力，确保了北京师范大学化学学科在全国高校的地位和国际上的影响力。其次是实验室的研究成果辐射到化学学院很多研究方向。以电子结构计算和动力学模拟为基础，诸多的化学和材料实验开始之前，都做了理性设计工作，不仅提高了实验效率，而且节约了实验成本；也有许多实验观察到了新奇的现象，但不清楚这些现象的微观本质，重点实验室的理论计算模拟，常常帮助解决了这些实验难题。重点实验室和化学学院的工作相互依赖、相互促进，有力地推动了化学学科快速发展。理论及计算光化学重点实验室不仅开展了理论化学领域的基础研究，还布局了化学、材料和放射性药物数据库。借助于深度机器学习，发展了大数据挖掘技术，与功能材料和药物研发交叉融合，产生了能源材料和放射性设计等新的研究方向，衍生出一些新的学科增长点。

## 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。

实验室成员承担了多门本科和研究生课程，包括《物理化学》、《结构化学》、《材料化学》、《化学信息学》、《化学测量与计算实验》、《化学综合设计实验》、《高等量子化学》、《gap等物理化学》、《数学物理方法》、《现代谱学院里与应用》和《现代化学研究方法学》等必修课。以重点实验室的研究工作为基础，开设了分子间化学反应、分子几何构想以及异构化学反应的“计算化学实验”，并编写了《计算化学实验》教材，获得了北京市的教改项目。同时开发了多个计算化学虚拟仿真实验，使真实情况下不可能完成的实验，可通过虚拟仿真技术得到了实现和显现，提高了学生探究式学习的能力和综合创新能力。祖莉莉教授主编了《化学测量实验》教材，有多位老师参与教改项目，并将实验室科研成果转化为教学资源。例如苏红梅老师将自己课题组最新研究成果转化为了研究生和本科生的教学实验“时间分辨荧光光谱方法”；陈玲课题组基于在倍频晶体研究方面的成就，为研究生和本科生开设了“非线性光学晶体生长”等综合实验课。范楼珍和高靓辉等6位重点实验室的老师一起录制了《物理化学》MOOC课程，已在中国大学MOOC和学堂在线网站开课多期，选课人数超过2万人次。

## 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。

除了本科教学，实验室的人才培养对象主要是研究生，代表性举措包括：

1. 充分利用实验室的人才优势，组建了一支精干的教师队伍，确保了研究生的培养水平和质量；
2. 将量子化学、实验方法与技术、化学前沿以及科学研究方法作为核心内容，既注重理论基础知识和综合实验技能，又聚焦学科前沿和挑战性问题，确保了研究生训练的基础性、前沿性和系统性；
3. 一方面注重基础知识，提升研究生的实验技能和素质，另一方面把科研成果作为研究生课程的教学内容，将知识学习和科研课题双向互动、深度融合，提高研究生的综合素质和科研能力；
4. 为研究生参加国内外学术会议创造条件，并将参加学术会议次数和成效纳入研究生的学分；
5. 与国际知名大学和科研机构联合培养研究生，优先考虑跨学科联合培养。

(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) Structural Disorder in Higher-Temperature Phases Increases Charge Carrier Lifetimes in Metal Halide Perovskites

(2) Suppressing Oxygen-Induced Deterioration of Metal Halide Perovskites by Alkaline Earth Metal Doping: A Quantum Dynamics Study

(3) Circularly Polarized Laser Emission from Homochiral Superstructures based on Achiral Molecules with Conformal Flexibility

(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 |
|----|--------|------|-------|--------------|----|
|----|--------|------|-------|--------------|----|

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。

在去年两个开放课题的基础上新增一个开放课题，诚邀国内科研院校的青年学者自由申请。申请人可利用本实验室集群和实验平台进行计算和实验，并与实验室固定人员充分合作。

| 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  | 光致变色有机硼化合物反应机理的理论研究      | 3    | 李全松 | 教授    | 北京理工大学 | 2020-08-01--2022-07-31 |
| 2  | 复杂体系从头算量子轨迹平均场（QTMF）方法   | 3    | 谢斌斌 | 助理研究员 | 浙江师范大学 | 2020-08-01--2022-07-31 |
| 3  | 1, 2-二氧杂环二酮的电子转移催化化学发光机制 | 3    | 岳玲  | 副教授   | 西安交通大学 | 2021-08-01--2023-07-31 |
| 4  | 生物环境中偶氮苯衍生物光异构化的研究       | 3    | 夏淑华 | 讲师    | 中央民族大学 | 2022-08-01--2024-07-31 |

注：职称一栏，请在在职人员填写职称，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 |
|----|------|--------|------|------|------|----|
|----|------|--------|------|------|------|----|

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. 实验室与欧美一些高水平大学和研究机构建立了长期稳定的合作关系，开展了卓有成效的学术和合作研究，取得了一系列重要的研究成果。此外，方维海教授作为中方主席，在2008年启动了中法双边理论化学会议，至今已经举办了7届。会议采用中法双方一对一讨论和之一的形式，进行报告和讨论，真正做到了以我为主、双方对等的深入交流，为双边会议成功举办的范例。在此基础上，中国三所大学（北京师范大学等）和法国7所大学共同签署了理论化学联盟协议。由于2022年的特殊性，实验室成员未能出国参加国际会议，但是采用线上交流讨论的方式进行国际交流和合作，出色的完成了实验室多个合作研究项目。
2. 实验室与大连化学物理研究所、中国科学技术大学和复旦大学合作，共同承担了国家自然科学基金委国家科学中心项目“动态化学前沿研究”项目。围绕化学反应动力学，除了基金委要求的定期总结汇报，每年项目组至少举办一次学术交流会议，有效地促进了国内的合作交流。

### (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。

重点实验室积极开展科学传播和化学只是普及的相关举措，通过鼓励高层次人才进行科普讲座、团队成员参加实验展演汇演活动、与电视媒体合作、同学开展化学文化节等丰富多彩的形式开展，得到了社会的认可和好评，有力地宣传了化学，纠正了民众对化学的误解。重点实验室每年联合化学学院组织高中生化学素养夏令营，邵久书和苏红梅等教授分别为参加夏令营的同学做“手性分子漫谈”、“探微DNA光化学反应过程”等科普讲座。为了传播化学知识，展现化学的魅力，重点实验室举办了Chem's新之旅-化学开放日活动。此次活动由实验一条街、化学知识展、化学实践前沿讲座、化学科普讲座、优秀化工企业展示、走进实验室、手工坊、化学趣味猜谜组成。分别向公众展示了生物柴油和可变色水凝胶的实验；我院同学向公众展示了大象牙膏、水中花园、晴雨花、喷雾作画等13个精彩有趣的化学实验，并对实验现象和原理进行了详细的解释。

## 2、运行管理

### (1) 学术委员会成员

| 序号 | 姓名  | 性别 | 职称  | 出生日期    | 工作单位     | 国别 |
|----|-----|----|-----|---------|----------|----|
| 1  | 张东辉 | 男  | 正高级 | 1967-01 | 中科院大化所   | 中国 |
| 2  | 吴骊珠 | 女  | 正高级 | 1967-11 | 中科院理化所   | 中国 |
| 3  | 黎书华 | 男  | 正高级 | 1969-07 | 南京大学     | 中国 |
| 4  | 李隽  | 男  | 正高级 | 1962-03 | 清华大学     | 中国 |
| 5  | 徐昕  | 男  | 正高级 | 1963-05 | 复旦大学     | 中国 |
| 6  | 罗毅  | 男  | 正高级 | 1965-02 | 中国科学技术大学 | 中国 |
| 7  | 陈雪波 | 男  | 正高级 | 1972-06 | 北京师范大学   | 中国 |

|    |     |   |     |         |        |    |
|----|-----|---|-----|---------|--------|----|
| 8  | 曹泽星 | 男 | 正高级 | 1962-12 | 四川大学   | 中国 |
| 9  | 苏红梅 | 女 | 正高级 | 1970-05 | 北京师范大学 | 中国 |
| 10 | 陈玲  | 女 | 正高级 | 1972-11 | 北京师范大学 | 中国 |
| 11 | 夏安东 | 男 | 正高级 | 1963-07 | 北京邮电大学 | 中国 |
| 12 | 帅志刚 | 男 | 正高级 | 1962-08 | 清华大学   | 中国 |
| 13 | 史强  | 男 | 正高级 | 1971-03 | 中科院化学所 | 中国 |
| 14 | 谢代前 | 男 | 正高级 | 1964-01 | 南京大学   | 中国 |
| 15 | 方维海 | 男 | 正高级 | 1955-12 | 北京师范大学 | 中国 |

## (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。

2022年11月12日下午学术委员会全体委员以及固定研究人员在线上举行学术委员会会议。

会议纪要

时 间：2022年11月12日14:00-17:00

地 点：线上

议 题：教育部理论及计算光化学教育部重点实验室年度总结与未来工作计划

参加人：学术委员会成员和重点实验室成员

会议议程：（1）崔刚龙教授总结理论及计算光化学教育部重点实验室本年度的研究工作以及下一年度工作计划；（2）学术委员会讨论

会议记录：刘丽虹

会议于11月12日14:00时正式开始。崔刚龙教授首先认真总结了2021年的科研和管理工作，内容如下：（1）理论与计算光化学教育部重点实验室的2021年度工作总结以及2022年的工作计划。（2）目前重点开展科研项目的进展情况，包括“科学中心项目”、“创新群体计划”、“重点项目”、“重大科研计划”、“国际合作”等。

学术委员会对上述总结进行了讨论，形成以下几点意见：

- 1、重点实验室在平台建设、科学研究、经费争取、发展新的理论计算方法等方面都取得了较好的成绩，特别是加强了实验和理论的紧密结合，解决了一些实际化学问题。
- 2、为了加强实验室的进一步发展建设，需要研究人员在目前的基础上更上一层楼，进一步推动国际理论化学的发展。

## (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。

学校高度重视理论及计算化学教育部重点实验室工作，对重点实验室的基础设施进行了维修，提供了充足的科研实验室空间；除了学校提供的日常经费60万元/年，实验室还获得了学校重点基地培育经费200万元/年和学校批准的“理论和应用光化学”交叉平台项目经费1000万元/年，在学科建设方面，学

校将理论及计算化学作为学科优先发展的特色方向，建立了国家实验室培育基地，协助申请并获得自然科学基金委“理论与计算光化学”创新研究群体计划支持、“量子化学生物学”获得了教育部创新团队择优支持；鼓励人才引进，协助引进了两名杰出青年基金获得者，7名国家高层次人才入选者；支持自主研究，并为新入职人员提供10万元的启动经费。科研院每年对实验室进行考核，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都给予优先考虑和支持。

### 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。

作为理论计算重要基础设施，本实验室建设了专用的高性能计算集群及其机房，先后共建设5台集群，包括DELL公司和曙光公司和四个批次四个型号。自建成后，高性能集群均处于100%高使用率状态，为本实验室的教师和学生提供全天24小时计算任务支持，共计约115,485,120核时/80用户左右。同时本实验室计算机集群对校内和校外用户提供计算服务。本实验室构建了YAG纳秒激光器、染料激光器、瞬态荧光光谱仪、纳秒激光闪光光解光谱仪，高分辨质谱/飞行质谱各一台，JEOL 600/400兆核磁共振波谱仪，激光共聚焦显微拉曼散射光谱仪，激光共聚焦显微镜。仪器的年科研专用机时为1500时每台。并每年以合作研究的方式安排60天以上的时间向用户开放，合作单位有北京大学、清华大学、中科院生态中心、中科院化学所、中科院生物物理所等。研制了多功能时间分辨傅里叶变换红外（TR-FTIR）光谱装置，包括气相发射光谱测量系统和液相吸收光谱测量系统，并与脉冲激光光源系统联用，能通过切换元件合理组合，实现不同的测试功能，可广泛用于研究气相、凝聚相和生命体系中各种复杂的物理化学微观动态过程。

### 4、实验室安全

说明实验室当年是否发生安全事故，如有需要填报详细信息，包括伤亡人数、经济损失、事故原因以及是否属于责任事故等。

实验室高度重视实验室安全，迄今为止并没有发生安全事故。

## 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：

实验室主任：

单位公章

年 月 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。）

依托单位负责人签字：

单位公章

年

月

日