

化学化工学院博士研究生培养方案

目 录

研究生培养简介.....	1
学分要求.....	2
学术学位博士.....	3
070301 无机化学.....	5
070303 有机化学.....	18
070304 物理化学.....	25

研究生培养简介

化学化工学院拥有化学一级学科博士学位授权点、化学一级学科硕士学位授权点。目前学术学位博士在无机化学、有机化学和物理化学三个学科方向（专业）招生。

培养类别	学习形式	专业代码	专业名称
学术学位博士	全日制	070301	无机化学
学术学位博士	全日制	070303	有机化学
学术学位博士	全日制	070304	物理化学

学分要求

课程类别			学术学位博士	备注
必修 课	公共必修课		5	
	专业 必修 课	专业基础课	9	
		专业方向课	2	
选修课			2	
总学分			18	

学术学位博士

学术学位博士

无机化学专业培养方案

一、培养目标

掌握坚实、宽广的化学基础知识和技能，深入系统掌握无机化学的专门知识、理论和研究方法，了解其现状和发展趋势。具有良好的科学素养和独立开展科学研究的能力，并在所从事的研究领域内取得创新成果。有适应交叉学科领域研究的能力，有强烈的创新意识。至少掌握一门外语，能用英语熟练阅读本专业的文献资料，具有良好的写作能力和进行国际学术交流的能力。熟练运用计算机与现代信息工具。

二、专业及研究方向

代码	研究方向名称	简要说明
01	功能配合物化学	设计合成具有特定功能的配合物，并研究其结构、性能及其相互关系。
02	无机材料化学	开发新型功能无机材料，研究其组成、结构与其光电催化等性质的关系。

三、学制与学习年限

全日制学术型博士研究生基本学制为 4 年（直博生 5 年），最长学习年限为 8 年。

四、培养方式

博士研究生的培养实行导师组领导下的导师负责制，坚持导师负责制与导师组集体培养相结合，系统、前沿的理论学习与广泛的社会实践相结合，注重因材施教，注重博士生思想政治教育。

博士生导师主要负责业务学习、学位论文选题和论文质量把关等方面的全面指导，指导小组的其他成员或辅助导师侧重参与课题的论证和关键技术问题等方面的指导。博士生指导小组由本学科或相关学科的不少于 2 名高级职称的专家组成。

导师应根据本学科培养方案的要求，结合博士生的基础和特长，在博士生入学后一个月内制订出博士生个人的培养计划，对研究方向、课程学习、学位论文工作的各个环节要求和进展做出具体规定。导师要全面关心博士生的成长，既教书又育人。

五、课程设置与学分

课程设置分为必修课和选修课，包括公共必修课、专业基础课、专业方向课、

专业选修课。无机化学专业博士研究生毕业须达到总学分 18 分，其中课程部分 18 学分，公共必修课、专业基础课、专业方向课、选修课分别为 5 学分、9 学分、2 学分、2 学分。

六、学术研讨与学术报告

博士研究生在学期间参加学术活动是培养过程中巩固基础、提高质量的必要环节。为培养研究生的学术研究能力和语言表达能力，营造良好的学术氛围，提高研究生培养质量，丰富学院学术文化生活，研究生在校期间参加各种类型的学术活动不得少于 10 次。研究生学术报告包括自己作专题学术报告、参加学术报告会、前沿讲座以及各种专题研讨班等。

七、中期考核

为确保博士研究生的培养质量，博士生在入学后第三学期，进行一次中期考核，学院学位评定分委员会要对博士研究生进行一次全面考核，内容包括思想品德和治学态度、课程学习、科研和工作能力等。

八、学位（毕业）论文

1. 在导师指导下，在广泛调查研究、阅读文献资料、弄清主攻方向的前沿成果和发展动态的基础上，博士生应在入学后第三学期第五周至第四学期第十周期间完成学位论文开题报告并参加博士论文开题报告会。

2. 开题报告要就以下内容进行认真论证：选题的背景意义、国内外研究动态及发展趋势、主要研究内容、拟采取的技术路线及研究方法、预期成果以及进度计划等。

3. 评审要求

（1）文献综述（具有独立搜集资料和分析、综合研究的能力，论述精辟、全面）；

（2）学术见解（把握学科前沿，学术思想开阔，选题新颖、合理，重点准确，预期目标得当）；

（3）实验研究方案（所选研究方法先进、适当，技术路线严密，措施得当，掌握技术资料准确，对可能遇到的问题分析合乎逻辑，有预见性，工作安排合理、紧凑）；

（4）表达能力（表述清楚、准确，能正确回答问题）。

（二）学位论文

博士学位论文是博士生培养质量和学术水平的集中反映，应在导师指导下由博士生独立完成。一般在入学后第三学期提出论文题目，经导师同意可开始收集材料和撰写。

学位论文工作是培养博士研究生提高创造能力和竞争能力的主体，是博士生学习阶段的中心环节。博士生应在不晚于入学后的第六学期，以自己的研究课题和发表的论文为基础，撰写博士论文，争取具有较高的学术水平。具体要求如下：

（1）博士学位论文应是系统完整的学术论文，应在科学上或专门技术上作出创新性学术成果的基础上总结和撰写。其内容和写作水平应能反映出博士生已经掌握了坚实宽广的基础理论和系统深入的专门知识，具备了独立从事教学或科学研究工作的能力。

（2）学位论文写作是博士生的工作能力和科学素质培养的重要环节。送审和

申请学位时递交的论文正式文本必须达到论述严谨、表达简练、文字通顺流畅。论文的结构、版式、公式和图表的格式、专业术语和计量单位的使用、参考文献引用格式、以及印刷（打印）和装订等均必须全面符合校研究生院颁布的《博士学位论文写作及答辩指南》中所规定的规范。文字质量差或格式不符合规范要求的博士学位论文，学位评定分委员会有权拒绝受理其作者的学位申请。

（3）博士生在学位论文工作中必须严格恪守科学研究的道德规范，坚决杜绝弄虚作假、抄袭剽窃等丑恶行为。违规者一经查实，取消其申请答辩和学位评定资格并按研究生学籍管理的有关规定从严处理。已通过的答辩一律宣告无效，已授的博士学位一律予以撤消。

（4）学位论文的实验工作期限及总完成期限、学位论文送审和答辩程序按学校有关规定严格执行。

九、附则

1. 本方案自 2023 级开始执行。

2. 如有与学校规定相悖之处，遵照学校相关规定执行。未尽事宜以学校研究生院相关文件为依据，由研究生和导师提交有关申请，由学院学位委员会审核后报送研究生院审批。

《课程设置与教学计划表》

学院（中心）：化学化工学院 学科、专业：无机化学

研究方向：01. 功能配合物化学 02. 无机材料化学。

课程类别		课程名称		学分	学时	开课学期	备注
必修 课	公共 必修 课	公共外语		2	32	1、2	
		中国马克思主义与当代		2	32	1	
		马克思主义经典著作选读		1	16	2	
	专业 必修 课	专业基础课	化学前沿与挑战	3	48	1	
		专业基础课	现代化学研究方法学	3	48	1	
		专业基础课	现代无机化学专论	3	48	1	
		专业方向课	01 配位超分子结构化学新进展	2	32	2	
		专业方向课	02 无机功能材料前沿领域专题研讨	2	32	2	
选修 课			科技论文写作与学术规范	2	32	2	
			学术报告与讨论	2	32	2	
			无机化学论文选读	2	32	2	

阅读参考书目

一、中文

1. 欧格尔 L E:《过渡金属化学导论——配位场理论》，游效曾等译，科学出版社，1966 年。
2. 施莱弗 H L, 格里曼 G. 《配位场理论基本原理》，曾成，王国雄等译，江苏科学技术出版社，1982 年。
3. 徐志固:《现代配位化学》，化学工业出版社，1987 年版。
4. 黄春辉:《稀土配位化学》，科学出版社，1987 年。
5. 陈慧兰，余宝源:《理论无机化学》高等教育出版社，1989 年。
6. 游效曾:《配位化学的结构和性质》，科学出版社，1992 年。
7. 赵成大:《理论无机化学—结构与反应机理》，东北师范大学出版社，1994 年。
8. 金斗满，朱文祥:《配位化学研究方法》，科学出版社，1996 年。
9. 卢嘉锡:《过渡金属原子簇化学的新进展》，福建科技出版社，1997 年。
10. 王夔，韩万书:《中国生物无机化学十年进展》，高等教育出版社，1997 年。
11. 唐敖庆，李前树:《原子簇的结果规则和化学键》，山东科学技术出版社，1998 年。
12. 王恩波，胡长文，许林:《多酸化学导论》，化学工业出版社，1998 年。
13. 游效曾:《分子材料—光电功能化合物》，上海科技出版社，2000 年。
14. 麦松威，周公度，李伟基:《高等无机结构化学》，北京大学出版社，香港中文大学出版社，2001。
15. 刘海涛，杨邈，张树军，林蔚:《无机材料合成》，化学工业出版社，2003 年。
16. 章慧:《配位化学：原理及应用》，化学工业出版社，2009 年。
17. 介万奇:《晶体生长原理与技术》，科学出版社，2010 年。
18. 辛剑，王慧龙:《高等无机化学》，高等教育出版社，2010 年。
19. 苏成勇，潘梅:《配位超分子结构化学基础与进展》，科学出版社，2010 年。
20. 张克立，张友祥，马晓玲:《固体无机化学》，武汉大学出版社，2012 年。
21. 赵新华:《固体无机化学基础及新材料的设计合成》，高等教育出版社，2012 年。
22. 于吉红，闫文付:《纳米孔材料化学》，科学出版社，2013 年。
23. 陈维林，王恩波:《多酸化学》，科学出版社，2016 年。
24. 林建华，荆西平，王颖霞，李彦:《无机材料化学》，北京大学出版社，2018 年。
25. 刘伟生:《配位化学》，化学工业出版社，2019 年。
26. 宋晓岚，黄学辉:《无机材料科学基础》，化学工业出版社，2020 年。
27. 张霞，王卓鹏:《无机材料结构与性能表征方法》，冶金工业出版社，2020 年。
28. 展树中:《现代无机化学》，化学工业出版社，2020 年。
29. 毛宗万:《生物无机化学导论》，科学出版社，2021 年。
30. 中国科学院:《中国学科发展战略:配位化学》，科学出版社，2022 年。
31. 吴庆银，高超，唐瑜:《现代无机合成与制备化学》，化学工业出版社，2023 年。

二、外文

1. Z. C. Hu, B. J. Deibert, J. Li, Luminescent metal-organic frameworks for chemical sensing and explosive detection, *Chem. Soc. Rev.*, 2014, 43, 5815-5840.
2. S. S. Bao, G. K. H. Shimizu, L. M. Zheng, Proton conductive metal phosphonate

- frameworks, *Coord. Chem. Rev.*, 2019, 378, 577-594.
3. C. Doonan, R. Riccò, K. Liang, D. Bradshaw, P. Falcaro, Metal-organic frameworks at the biointerface: synthetic strategies and applications, *Acc. Chem. Res.*, 2017, 50, 1423-1432.
 4. S. Begum, Z. Hassan, S. Bräse, C. Wöl, M. Tsotsala, Metal-organic framework-templated biomaterials: recent progress in synthesis, functionalization, and applications, *Acc. Chem. Res.*, 2019, 52, 1598-1610.
 5. J. D. Xiao, H. L. Jiang, Metal-organic frameworks for photocatalysis and photothermal catalysis, *Acc. Chem. Res.*, 2019, 52, 356-366.
 6. Y. Wang, Q. Wang, Q. C. Xia, W. J. Yang, X. X. Wang, S. P. Sun, W. H. Xing, Nanocapsule controlled interfacial polymerization finely tunes membrane surface charge for precise molecular sieving, *Chem. Eng. J.*, 2021, 409, 128198.
 7. L. Y. Chen, M. Y. Jiang, Q. Zou, S. W. Xiong, Z. G. Wang, L. S. Cui, H. Guo, T. Zhou, J. G. Gai, Highly permeable carbon nanotubes/polyamide layered membranes for molecular sieving, *Chem. Eng. J.*, 2021, 425, 130684.
 8. C. Tian, S. Q. Han, J. Y. Zhu, S. C. Cao, J. Wang, R. Li, Y. H. Jin, Y. T. Zhang, B. V. D. Bruggen, In situ growth of multifunctional porous organic polymer nanofilms with molecular sieving and catalytic abilities, *Chem. Eng. J.*, 2022, 427, 130978.
 9. G. L. Yang, Y. J. Qian, D. Liu, L. F. Wang, Y. X. Ma, J. H. Sun, Y. Y. Su, K. Jarvis, X. G. Wang, W. W. Lei, Simultaneous electrokinetic energy conversion and organic molecular sieving by two-dimensional confined nanochannels, *Chem. Eng. J.*, 2022, 446, 136870.
 10. J. Liu, B. Y. Zhang, Y. M. Fo, J. Gao, W. Q. Yu, H. W. Ren, X. J. Cui, X. Zhou, L. H. Jiang, Unique Ru nanoclusters confined in carbon molecular sieve coatings with tailoring sub-4 Å ultramicropores as a highly efficient and CO-tolerant hydrogen oxidation electrocatalyst, *Chem. Eng. J.*, 2023, 468, 143438.
 11. F. Zhang, W. L. Jiao, Y. Si, J. Y. Yu, P. Zhang, B. Ding, Tailoring nanoporous-engineered sponge fiber molecular sieves with ternary-nested architecture for precise molecular separation, *ACS Nano.*, 2021, 15, 13623-13632.
 12. T. Zorlu, I. B. Becerril-Castro, B. Puertolas, V. Giannini, M. A. Correa-Duarte, R. A. Alvarez-Puebla, Yolk-shell nanostars@Metal organic frameworks as molecular sieves for optical sensing and catalysis, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2023, 62, e202305299.
 13. S. L. Li, G. L. Chang, Y. Z. Huang, K. Kinooka, Y. T. Chen, W. M. Fu, G. H. Gong, T. Yoshioka, N. B. McKeown, Y. X. Hu, 2,2'-Biphenol-based ultrathin microporous nanofilms for highly efficient molecular sieving separation, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2022, 61, e202212816.
 14. F. Zhang, Y. Si, J. Y. Yu, B. Ding, Sub-nanoporous engineered fibrous aerogel molecular sieves with nanogating channels for reversible molecular separation, *Small.*, 2022, 18, e2202173.
 15. J. Y. Zhao, Y. Zhang, H. R. Guo, H. T. Zhang, J. K. Ren, R. Song, Rational regulation of crystalline/amorphous microprisms-nanochannels based on molecular sieve (VSB-5) for electrochemical overall water splitting, *Small.*, 2022, 18, e2200832.
 16. C. Sobhan, X. Y. Lou, F. Liang, Y. W. Yang, Surface-functionalized gold and silver

- nanoparticles for colorimetric and fluorescent sensing of metal ions and biomolecules, *Coord. Chem. Rev.*, 2022, 459, 214461.
17. C. Jia, T. He, G. M. Wang, Zirconium-based metal-organic frameworks for fluorescent sensing, *Coord. Chem. Rev.*, 2023, 476, 214930.
 18. X. P. Yang, Q. Q. Zhang, S. Y. Zhang, M. Lai, X. M. Ji, Y. Ye, H. C. Li, M. Q. Zhao, Molecule fluorescent probes for sensing and imaging analytes in plants: Developments and challenges, *Coord. Chem. Rev.*, 2023, 487, 215254.
 19. F. Wang, W. Q. Wang, Y. Q. Wang, W. Zheng, T. Zheng, L. L. Zhang, Y. Okamoto, J. Shen, Synthesis of amylose and cellulose derivatives bearing bulky pendants for high-efficient chiral fluorescent sensing, *Carbohydr Polym.*, 2023, 311, 120769.
 20. M. M. Yan, D. M. He, L. S. Zhang, P. J. Sun, Y. Q. Sun, L. B. Qu, Z. H. Li, Explorations into the meso-substituted BODIPY-based fluorescent probes for biomedical sensing and imaging, *Trends. Analyt. Chem.*, 2022, 157, 116771.
 21. C. Dai, H. L. Qian, X. P. Yan, Facile room temperature synthesis of ultra-small sized porous organic cages for fluorescent sensing of copper ion in aqueous solution, *J. Hazard. Mater.*, 2021, 416, 125860.
 22. L. L. Liu, D. Li, W. Deng, Stimuli-responsive microgels with fluorescent and SERS activities for water and temperature sensing, *Biosens. Bioelectron.*, 2021, 180, 113138.
 23. Y. H. Wang, Z. S. Shao, C. Cheng, J. L. Wang, Z. Song, W. J. Song, F. Zheng, H. S. Wang, Fluorescent oligonucleotide indicators for ratiometric microRNA sensing on metal-organic frameworks, *Chem. Eng. J.*, 2022, 437, 135296.
 24. W. X. Gao, Q. Li, W. C. Zhong, X. M. Zhou, Y. B. Ge, Q. L. Yan, L. Shang, Gold nanoclusters-engineered dual-emitting nanofibrous film for fluorescent discrimination and visual sensing of explosives, *Chem. Eng. J.*, 2023, 456, 140982.
 25. L. L. Qin, J. Cao, D. Lin, S. H. Xu, Y. C. Li, C. L. Jiang, A strecker-like reaction triggering fluorescent sensing platform for enzyme-free and visual quantitative monitoring of carbamates, *Chem. Eng. J.*, 2023, 464, 142550.
 26. Y. Ke, Y. Liu, B. Y. Zu, D. Lei, G. F. Wang, J. G. Li, W. F. Ren, X. C. Dou, Electronic tuning in reaction-based fluorescent sensing for instantaneous and ultrasensitive visualization of ethylenediamine, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2022, 61, e202203358.
 27. L. A. Perez-Marquez, M. D. Perretti, R. Garcia-Rodriguez, F. Lahoz, R. Carrillo, A fluorescent cage for supramolecular sensing of 3-nitrotyrosine in human blood serum, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2022, 61, e202205403.
 28. K. Xue, C. Wang, J. X. Wang, S. Y. Lv, B. Y. Hao, C. L. Zhu, B. Z. Tang, A sensitive and reliable organic fluorescent nanothermometer for noninvasive temperature sensing, *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, 143, 14147-14157.
 29. Y. L. Huang, A. K. Pathak, J. Y. Tsai, C. Rumsey, M. Ivill, N. Kramer, Y. Hu, M. Trebbin, Q. M. Yan, S. Q. Ren, Pressure-controlled magnetism in 2D molecular layers, *Nat. Commun.*, 2023, 14, 3186.
 30. G. C. Zhu, Y. S. Jiang, Y. Wang, B. X. Wang, Y. Q. Zheng, Y. F. Liu, L. X. Kang, Z. B. Li, D. D. Guan, Y. Y. Li, H. Zheng, C. H. Liu, J. F. Jia, T. Lin, P. N. Liu, D. Y. Li, S. Y. Wang, Collective quantum magnetism in nitrogen-doped nanographenes, *J. Am.*

- Chem. Soc.*, 2023, 145, 7136-7146.
31. X. K. Teng, J. S. Oh, H. X. Tan, L. B. Chen, J. W. Huang, B. Gao, J. X. Yin, J. H. Chu, M. Hashimoto, D. H. Lu, C. Jozwiak, A. Bostwick, E. Rotenberg, G. E. Granroth, B. H. Yan, R. J. Birgeneau, P. C. Dai, M. Yi, Magnetism and charge density wave order in kagome FeGe, *Nature Physics*, 2023, 19, 814-822.
 32. L. Munzfeld, M. Dahlen, A. Hauser, N. Mahieu, S. K. Kuppasamy, J. Moutet, M. Tricoire, R. Koppe, L. L. Droitte, O. Cador, G. B. Le, G. Nocton, E. M. Pineda, M. Ruben, P. W. Roesky, Molecular lanthanide switches for magnetism and photoluminescence, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2023, 62, e202218107.
 33. X. Liu, Y. L. Du, S. Moudikoudis, G. C. Zheng, K. Y. Wong, Chiral magnetic oxide nanomaterials: Magnetism meets chirality, *Adv. Opt. Mater.*, 2023, 2202859.
 34. N. Wei, L. C. He, C. W. Wu, D. B. Lu, R. H. Li, H. W. Shi, H. H. Lan, Y. Wen, J. He, Y. W. Long, X. Wang, M. Q. Zeng, L. Fu, Room-temperature magnetism in 2D MnGa₄-H induced by hydrogen insertion, *Adv. Mater.*, 2023, 35, 2210828.
 35. Q. Yu, D. Wang, Room-temperature magnetism in two-dimensional metal–organic frameworks enabled by electrostatic gating, *J. Mater. Chem. A.*, 2023, 11, 5548-5558.
 36. J. Bréhin, Y. Chen, M. D’Antuono, S. Varotto, D. Stornaiuolo, C. Piamonteze, J. Varignon, M. Salluzzo, M. Bibes, Coexistence and coupling of ferroelectricity and magnetism in an oxide two-dimensional electron gas, *Nature Physics*, 2023, 19, 823-829.
 37. S. Shao, J. X. Yin, I. Belopolski, J. Y. You, T. Hou, H. Y. Chen, Y. X. Jiang, M. S. Hossain, M. Yahyavi, C. H. Hsu, Y. P. Feng, A. Bansil, M. Z. Hasan, G. Q. Chang, Intertwining of magnetism and charge ordering in kagome FeGe, *ACS Nano*, 2023, 17, 10164-10171.
 38. J. Wang, C. Zhu, F. Luo, J. F. Wang, X. He, Y. Zhang, H. X. Liu, Z. G. Sun, Magnetism modulation for cryogenic thermoelectric enhancements in Fe₃O₄ nanoparticle-incorporated Bi_{0.85}Sb_{0.15} nanocomposites, *Appl. Mater. Interfaces*, 2023, 15, 8105-8119.
 39. B. Mohan, S. Kumar, H. Xi, S. Ma, Z. Tao, T. Xing, H. You, Y. Zhang, P. Ren, Fabricated metal-organic frameworks (MOFs) as luminescent and electrochemical biosensors for cancer biomarkers detection, *Biosens. Bioelectron.*, 2022, 197, 113738.
 40. F. Mo, Q. Zhou, Q. Wang, Z. L. Hou, J. L. Wang, The applications of MOFs related materials in photoelectrochemical decontamination an updated review, *Chem. Eng. J.*, 2022, 450, 138326.
 41. B. Yan, Luminescence response mode and chemical sensing mechanism for lanthanide-functionalized metal–organic framework hybrids, *Inorg. Chem. Front.*, 2021, 8, 201-233.
 42. S. Lin, S. M. Chen, Y. Ju, F. H. Xiang, W. J. Wei, X. Wang, S. C. Xiang, Z. J. Zhang, Electrical bistability based on metal–organic frameworks, *Chem. Commun.*, 2022, 58, 9971-9978.
 43. T. Jia, Y. F. Gu, F. T. Li, Progress and potential of metal-organic frameworks (MOFs) for gas storage and separation: A review, *J. Environ. Chem. Eng.*, 2022, 10, 108300.

44. A. Tchinsa, M. F. Hossain, T. Wang, Y. B. Zhou, Removal of organic pollutants from aqueous solution using metal organic frameworks (MOFs)-based adsorbents: A review, *Chemosphere*, 2021, 284, 131393.
45. E. F. H. Alzaimoor, E. Khan, Metal–organic frameworks (MOFs)-based sensors for the detection of heavy metals: A review, *Crit. Rev. Anal. Chem.*, 2023, 1-22.
46. Y. T. Shi, Y. Y. Zou, M. S. Khan, M. G. Zhang, J. Yan, X. H. Zheng, W. Q. Wang, Z. G. Xie, Metal–organic framework-derived photoelectrochemical sensors: Structural design and biosensing technology, *J. Mater. Chem. C.*, 2023, 11, 3692-3709.
47. H. Sohrabi, S. Ghasemzadeh, Z. Ghoreishi, R. M. Majidi, Y. Yoon, N. Dizge, A. Khataee, metal-organic frameworks (MOF)-based sensors for detection of toxic gases: a review of current status and future prospects, *Mater. Chem. Phys.*, 2023, 299.
48. Y. F. Zhao, D. Li, Lanthanide-functionalized metal–organic frameworks as ratiometric luminescent sensors, *J. Mater. Chem. C.*, 2020, 8, 12739-12754.
49. L. Chen, D. H. Liu, J. Peng, Q. Z. Du, H. He, Ratiometric fluorescence sensing of metal-organic frameworks: tactics and perspectives, *Coord. Chem. Rev.*, 2020, 404, 213113.
50. B. B. Guo, J. C. Yin, N. Li, Z. X. Fu, X. Han, J. L. Xu, X. H. Bu, Recent progress in luminous particle-encapsulated host-guest metal-organic frameworks for optical applications, *Adv. Optical. Mater.*, 2021, 2100283.
51. S. Kusumoto, Y. Kim, S. Hayami, Flexible metal complex crystals in response to external mechanical stimuli, *Coord. Chem. Rev.*, 2023, 475, 214890.
52. Q. Guan, Y. Lei, F. X. Wu, R. W. Ou, X. Y. Zhang, H. Xie, M. Y. Tang, G. S. Zeng, Stimuli responsive metal organic framework materials towards advanced smart application, *Mater. Today*, 2023, 64, 138-164.
53. X. Y. Song, Y. Wang, C. Wang, D. Wang, G. W. Zhuang, K. O. Kirlikovali, P. Li, O. K. Farha, Design rules of hydrogen-bonded organic frameworks with high chemical and thermal stabilities, *J. Am. Chem. Soc.*, 2022, 144, 10663-10687.
54. J. Liu, L. Jiang, S. R. He, J. Zhang, W. Shao, Recent progress in PNIPAM-based multi-responsive actuators: A mini-review, *Chem. Eng. J.*, 2022, 433, 133496.
55. A. Athanasios G, Z. C. Ma, M. G. Nicolas, M. Kai, E. J. Choi, G. Rahul, F. Peer, Ultrasound-responsive systems as components for smart materials, *Chem. Rev.*, 2022, 122, 5165-5208.
56. Z. W. Li, Q. S. Fan, Y. D. Yin, Colloidal self-assembly approaches to smart nanostructured materials, *Chem. Rev.*, 2022, 122, 4976-5067.
57. M. Su, Y. L. Song, Printable smart materials and devices: Strategies and applications, *Chem. Rev.*, 2022, 122, 5144-5164.
58. J. Zhang, B. Z. He, Y. B. Hu, P. Alam, H. K. Zhang, J. W. Y. Lam, B. Z. Tang, Stimuli-responsive AIEgens, *Adv. Mater.*, 2021, 33, 2008071.
59. H. B. Cheng, S. C. Zhang, J. Qi, X. J. Liang, J. Y. Yoon, Advances in application of azobenzene as a trigger in biomedicine: Molecular design and spontaneous assembly, *Adv. Mater.*, 2021, 33, 2007290.
60. Y. Zhuang, R. J. Xie, Mechanoluminescence rebrightening the prospects of stress sensing: A review, *Adv. Mater.*, 2021, 33, 2005925.

61. Y. Y. Wang, Y. M. Zhang, S. X. A. Zhang, Stimuli-induced reversible proton transfer for stimuli-responsive materials and devices, *Acs. Chem. Res.*, 2021, 54, 2216-2226.
62. R. Annapragada, K. R. Vandavasi, P. R. Kanuparth, Metal-organic framework membranes for proton exchange membrane fuel cells: A mini-review. *Inorg Chim Acta.*, 2023, 546.
63. B. X. Han, Y. F. Jiang, X. R. Sun, Z. F. Li, G. Li, Proton conductive N-heterocyclic metal-organic frameworks, *Coordin. Chem. Rev.*, 2021, 432.
64. N. A. Khan, M. Luo, X. Zha, C. S. Azad, J. Lu, J. Chen, C. Fan, A. U. Rahman, M. A. Olson, Z. Jiang, D. Wang, Water/Vapor assisted fabrication of large-area superprotonic conductive covalent organic framework membranes, *Small.*, 2023, e2303131.
65. N. H. Kwon, S. Han, J. Kim, E. S. Cho, Super proton conductivity through control of hydrogen-bonding networks in flexible metal-organic frameworks, *Small.*, 2023, e2301122.
66. S. Liu, M. Liu, X. Li, Q. Xu, Y. Sun, G. Zeng, Construction of dense H-bond acceptors in the channels of covalent organic frameworks for proton conduction, *J. Mater. Chem. A.*, 2023.
67. Y. R. Liu, Y. Y. Chen, Q. Zhuang, G. Li, Recent advances in MOFs-based proton exchange membranes, *Coordi. Chem. Rev.*, 2022, 471.
68. 7. H. M. Ren, H. W. Wang, Y. F. Jiang, Z. X. Tao, C. Y. Mu, G. Li, Proton conductive lanthanide-based metal-organic frameworks: Synthesis strategies, structural features, and recent progress, *Top Curr. Chem.*, 2022, 380, 9.
69. A. Sharma, J. Lim, S. Lee, S. Han, J. Seong, S. B. Baek, M. S. Lah, Superprotonic conductivity of MOFs confining zwitterionic sulfamic acid as proton source and conducting medium, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 2023, e202302376.
70. M. Szufla, J. A. R. Navarro, K. Gora-Marek, D. Matoga, Effect of missing-linker defects and ion exchange on stability and proton conduction of a sulfonated layered Zr-MOF, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2023, 15, 28184-28192.
71. X. X. Xie, Y. C. Yang, B. H. Dou, Z. F. Li, G. Li, Proton conductive carboxylate-based metal-organic frameworks, *Coordi. Chem. Reviews*, 2020, 403.
72. Y. Y. Xing, J. Wang, C. X. Zhang, Q. L. Wang, High proton conductivity of the UiO-66-NH(2)-SPES composite membrane prepared by covalent cross-linking, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2023.
73. S. L. Zhang, Z. C. Guo, K. Xu, Z. Li, G. Li, Design, preparation, and high intrinsic proton conductivity of two highly stable hydrazone-linked covalent organic frameworks, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2023.
74. Y. C. Miao, M. F. Shao, Photoelectrocatalysis for high-value-added chemicals production, *CHINESE. J. CATAL.*, 2022, 43, 595-610.
75. H. Wu, D. Zhang, B. X. Lei, Z. Q. Liu, Metal oxide based photoelectrodes in photoelectrocatalysis: advances and challenges, *ChemPlusChem*, 2022, 87, E202200097.
76. J. L. Xie, S. X. Wang, T. M. Lu, S. Yang, L. Zou, J. Ren, X. Y. Lu, J. Huang, C. Huang, P. P. Yang, Evaluating high temperature photoelectrocatalysis of TiO₂ model photoanode, *J. COLLOID. INTERF.*, 2023, 645, 765-74.

77. H. J. Chen, Y. L. Yang, M. Hong, J. G. Chen, G.Q. Suo, X. J. Hou, L. Feng, Z. G. Chen, Separable and recyclable meso-carbon@TiO₂/carbon fiber composites for visible-light photocatalysis and photoelectrocatalysis, *sustainable materials and technologies.*, 2019, 21, E00105.
78. D. Liu, X. Y. Wan, T. T. Kong, W.W. Han, Y. J. Xiong, Single-atom-based catalysts for photoelectrocatalysis: Challenges and opportunities, *J. Mater. chem. A.*, 2022, 11, 5878-5888.
79. L. Pan, S. C. Sun, Y. Chen, P. H. Wang, J. Y. Wang, X.W. Zhang, J. J. Zou, Z. L. Wang, Advances in piezo-phototronic effect enhanced photocatalysis and photoelectrocatalysis, *Adv. Energy Mater.*, 2020, 15, 2000214.
80. C. F. Li, R. T. Guo, Z. R. Zhang, T. Wu, W. G. Pan, Converting CO₂ into value-added products by Cu₂O-based catalysts: From photocatalysis, electrocatalysis to photoelectrocatalysis, *Small.*, 2023, 19.
81. W. F. Chen, S.Y. Liu, Y. K. Fu, H. C. Yan, L. Qin, C. Lai, C. Zhang, H. Y. Ye, W. J. Chen, F. Z. Qin, F. H. Xu, X. Q. Huo, H. Qin, Recent advances in photoelectrocatalysis for environmental applications: Sensing, pollutants removal and microbial inactivation, *Coordin Chem. Rev.*, 2022, 454, 214341.
82. Y. Zhang, X. Xu, J. J. Cai, Y. W. Pan, M. H. Zhou, Degradation of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid by a novel photoelectrocatalysis/photoelectro-fenton process using blue-TiO₂ nanotube arrays as the anode, *Chemosphere*, 2021, 266, 129063.
83. H. Rajput, E. E. Kwon, S. A. Younis, S. Y. Weon, T. H. Jeon, W. Y. Choi, K. H. Kim, Photoelectrocatalysis as a high-efficiency platform for pulping wastewater treatment and energy production, *Chem. Eng. J.*, 2021, 412, 128612.
84. X. F. Chen, G. H. Zhang, B. Li, L. X. Wu, An integrated giant polyoxometalate complex for photothermally enhanced catalytic oxidation, *Sci. Adv.*, 2021, 7, 8413.
85. Q. Huang, Q. Niu, X. F. Li, J. Liu, S. N. Sun, L. Z. Dong, S. L. Li, Y. P. Cai, Y. Q. Lan, Demystifying the roles of single metal site and cluster in CO₂ reduction via light and electric dual-responsive polyoxometalate-based metal-organic frameworks, *Sci. Adv.*, 2022, 8, 5598.
86. M. Malmir, M. M. Heravi, Z. Y. Ghasemi, M. Mirzae, Incorporating heterogeneous lacunary Keggin anions as efficient catalysts for solvent-free cyanosilylation of aldehydes and ketones, *Sci. Rep.*, 2022, 12, 11573.
87. R. Lampl, J. Breibeck, N. I. Gumerova, M. S. Galanski, A. Rompel, Wells–dawson phosphotungstates as mushroom tyrosinase inhibitors: a speciation study, *Sci. Rep.*, 2021, 11, 19354.
88. J. X. Duan, H. Shabbir, Z. H. Y. Chen, W. T. Bi, Q. Liu, J. Y. Sui, L. Đorđević, K. W. Chapman, B. F. Martinson, A. Li, R. D. Schaller, S. Goswami, R. B. Getman, J. T. Hupp, Synthetic access to a framework-stabilized and fully sulfided analogue of an anderson polyoxometalate that is catalytically competent for reduction reactions, *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, 145, 7268-7277.
89. H. L. Li, C. Lian, G. Y. Yang, A ring-shaped 1,2-Ti-substituted poly (polyoxometalate): Synthesis, structure, and catalytic properties, *Sci. Chi. Chem.*, 2022, 65, 892-897.

90. L. H. Lin, F. F. Wei, R. Jiang, Y. C. Huang, S. Lin, The role of central heteroatom in electrochemical nitrogen reduction catalyzed by polyoxometalate-supported single-atom catalyst, *Nano Res.*, 2023, 16, 309-317.
91. S. Z. Chang, H. Y. An, Y. H. Chen, Q. S. Zhu, H. Y. Luo, Y. H. Huang, Highly efficient supramolecular catalysts assembled by dawson-type POMs and metal-organic complexes for the synergistic catalytic synthesis of p-Benzoquinones, *ACS Sustain. Chem. Eng.*, 2022, 10, 4728-4740.
92. F. Wang, R. Neumann, C. D. Graaf, J. M. Poblet, Photoreduction mechanism of CO₂ to CO catalyzed by a three-component hybrid construct with a bimetallic rhenium catalyst, *ACS Catal.*, 2021, 11, 1495-1504.
93. Y. N. Xue, P. H. Shao, Y. X. Yuan, W. X. Shi, F. Y. Cui, Activating the basal plane of 2H-MoS₂ by doping phosphor for enhancement in the photocatalytic degradation of organic contaminants, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2021, 13, 38586-38594.
94. Y. L. Wang, J. Song, W. Y. Wong, Constructing 2D sandwich-like MOF/MXene heterostructures for durable and fast aqueous zinc-ion batteries, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, 62, e202218343.
95. H. L. Liu, H. G. Pan, M. Yan, X. Zhang, Y. Z. Jiang, Extraordinary ionic conductivity excited by hierarchical ion-transport pathways in MOF-Based quasi-solid electrolytes, *Adv. Mater.*, 2023, 35, 2300888.
96. Z. D. Hao, Y. Wu, Q. Zhao, J. D. Tang, Q. Q. Zhang, X. X. Ke, J. B. Liu, Y. H. Jin, H. Wang, Functional separators regulating ion transport enabled by metal-organic frameworks for dendrite-free lithium metal anodes, *Adv. Funct. Mater.*, 2021, 31, 2102938.
97. J. Q. Yang, J. F. Chen, X. M. Wang, D. X. Yang, Y. W. Zhang, Y. Q. Wu, Y. Y. Zhao, Y. L. Wang, Q. Y. Wei, R. J. Wang, Y. Y. Liu, Y. W. Yang, Improving oxygen reduction reaction of microbial fuel cell by titanium dioxide attaching to dual metal organic frameworks as cathode, *Bioresource Technology.*, 2022, 349, 126851.
98. S. S. A. Shah, T. Najam, M. S. Bashir, M. S. Javed, A. Rahman, R. Luque, S. J. Bao, Identification of catalytic active sites for durable proton exchange membrane fuel cell: Catalytic degradation and poisoning perspectives, *Small.*, 2022, 18, 2106279.
99. L. J. Kong, M. Liu, H. Huang, Y. H. Xu, X. H. Bu, Metal/Covalent-organic framework based cathodes for metal-ion Batteries, *Adv. Energy Mater.*, 2022, 12, 2100172.
100. X. F. Lu, Y. J. Fang, D. Y. Luan, X. W. D. Lou, Metal-organic frameworks derived functional materials for electrochemical energy storage and conversion: A mini review, *Nano Lett.*, 2021, 21, 1555-1565.
101. L. J. Kong, M. Cheng, H. Huang, J. D. Pang, S. Liu, Y. H. Xu, X. H. Bu, Metal-organic frameworks for advanced aqueous ion batteries and supercapacitors, *EnergyChem.*, 2022, 4, 100090.
102. Z. Y. Sang, J. X. Liu, X. Q. Zhang, L. C. Yin, F. Hou, J. Liang, One-dimensional π -d conjugated conductive metal-organic framework with dual redoxactive sites for high-capacity and durable cathodes for aqueous zinc batteries, *ACS Nano.*, 2023, 17, 3077-3087.

103. Z. J. Chen, K. O. Kirlikovali, K. B. Idrees, M. C. Wasson, O. K. Farha, Porous materials for hydrogen storage, *Chem.*, 2022, 8, 693–716.

学术学位博士

有机化学专业培养方案

一、培养目标

掌握坚实、宽广的化学基础知识和技能，深入系统掌握有机化学的专门知识、理论和研究方法，了解其现状和发展趋势。具有良好的科学素养和独立开展科学研究的能力，并在所从事的研究领域内取得创新成果。有适应交叉学科领域研究的能力，有强烈的创新意识。至少掌握一门外语，能用英语熟练阅读本专业的文献资料，具有良好的写作能力和进行国际学术交流的能力。熟练运用计算机与现代信息工具。

二、专业及研究方向

代码	研究方向名称	简要说明
01	有机超分子化学	有机框架化合物的分子之间相互作用及具有 $D \cdots A$ 分子识别功能的有机多孔框架材料的设计与组装。
02	金属有机-多酸化学	多金属氧酸盐与有机小分子合成、表征及性能。
03	有机合成化学	从事高效高选择性绿色有机合成方法学研究，天然产物及其类似化合物的设计、合成及生物活性研究，功能有机材料的设计、合成、表征及性能研究，药物分子的设计、合成及应用研究。

三、学制与学习年限

全日制学术型博士研究生基本学制为 4 年（直博生 5 年），最长学习年限为 8 年。

四、培养方式

博士研究生的培养实行导师组领导下的导师负责制，坚持导师负责制与导师组集体培养相结合，系统、前沿的理论学习与广泛的社会实践相结合，注重因材施教，注重博士生思想政治教育。

博士生导师主要负责业务学习、学位论文选题和论文质量把关等方面的全面指导，指导小组的其他成员或辅助导师侧重参与课题的论证和关键技术问题等方面的指导。博士生指导小组由本学科或相关学科的不少于 2 名高级职称的专家组成。

导师应根据本学科培养方案的要求，结合博士生的基础和特长，在博士生入学后一个月内制订出博士生个人的培养计划，对研究方向、课程学习、学位论文工作

的各个环节要求和进展做出具体规定。导师要全面关心博士生的成长，既教书又育人。

五、课程设置与学分

课程设置分为必修课和选修课，包括公共必修课、专业基础课、专业方向课、专业选修课。有机化学专业博士研究生毕业须达到总学分 20 分，其中课程部分 20 学分，公共必修课、专业基础课、专业方向课学分分别为 7 学分、9 学分、2 学分。

六、学术研讨与学术报告

博士研究生在学期间参加学术活动是培养过程中巩固基础、提高质量的必要环节。为培养研究生的学术研究能力和语言表达能力，营造良好的学术氛围，提高研究生培养质量，丰富学院学术文化生活，研究生在校期间参加各种类型的学术活动不得少于 10 次。研究生学术报告包括自己作专题学术报告、参加学术报告会、前沿讲座以及各种专题研讨班等。

七、中期考核

为确保博士研究生的培养质量，博士生在入学后第四学期初，进行一次中期考核，学院学位评定分委员会要对博士研究生进行一次全面考核，内容包括思想品德和治学态度、课程学习、科研和工作能力等。

八、学位（毕业）论文

（一）论文开题

1. 在导师指导下，在广泛调查研究、阅读文献资料、弄清主攻方向的前沿成果和发展动态的基础上，博士生应在入学后第三学期第五周至第四学期第十周期间完成学位论文开题报告并参加博士论文开题报告会。

2. 开题报告要就以下内容进行认真论证：选题的背景意义、国内外研究动态及发展趋势、主要研究内容、拟采取的技术路线及研究方法、预期成果以及进度计划等。

3. 评审要求

（1）文献综述（具有独立搜集资料和分析、综合研究的能力，论述精辟、全面）；

（2）学术见解（把握学科前沿，学术思想开阔，选题新颖、合理，重点准确，预期目标得当）；

（3）实验研究方案（所选研究方法先进、适当，技术路线严密，措施得当，掌握技术资料准确，对可能遇到的问题分析合乎逻辑，有预见性，工作安排合理、紧凑）；

（4）表达能力（表述清楚、准确，能正确回答问题）。

（二）学位论文

博士学位论文是博士生培养质量和学术水平的集中反映，应在导师指导下由博士生独立完成。一般在入学后第三学期提出论文题目，经导师同意可开始收集材料和撰写。

学位论文工作是培养博士研究生提高创造能力和竞争能力的主体，是博士生学习阶段的中心环节。博士生应在不晚于入学后的第六学期，以自己的研究课题和发

表的论文为基础，撰写博士论文，争取具有较高的学术水平。具体要求如下：

（1）博士学位论文应是系统完整的学术论文，应在科学上或专门技术上作出创新性学术成果的基础上总结和撰写。其内容和写作水平应能反映出博士生已经掌握了坚实宽广的基础理论和系统深入的专门知识，具备了独立从事教学或科学研究工作的能力。

（2）学位论文写作是博士生的工作能力和科学素质培养的重要环节。送审和申请学位时递交的论文正式文本必须达到论述严谨、表达简练、文字通顺流畅。论文的结构、版式、公式和图表的格式、专业术语和计量单位的使用、参考文献引用格式、以及印刷（打印）和装订等均必须全面符合校研究生院颁布的《博士学位论文写作及答辩指南》中所规定的规范。文字质量差或格式不符合规范要求的博士学位论文，学位评定分委员会有权拒绝受理其作者的学位申请。

（3）博士生在学位论文工作中必须严格恪守科学研究的道德规范，坚决杜绝弄虚作假、抄袭剽窃等丑恶行为。违规者一经查实，取消其申请答辩和学位评定资格并按研究生学籍管理的有关规定从严处理。已通过的答辩一律宣告无效，已授的博士学位一律予以撤消。

（4）学位论文的实验工作期限及总完成期限、学位论文送审和答辩程序按学校有关规定严格执行。

九、附则

1. 本方案自 2023 级开始执行。

2. 如有与学校规定相悖之处，遵照学校相关规定执行。未尽事宜以学校研究生院相关文件为依据，由研究生和导师提交有关申请，由学院学位委员会审核后报送研究生院审批。

《课程设置与教学计划表》

学院（中心）：化学化工学院 学科、专业：有机化学

研究方向：01. 有机超分子化学、02. 金属有机-多酸化学、03. 有机合成化学

课程类别		课程名称		学分	学时	开课学期	备注
必修 课	公共 必修 课	公共外语		2	32	1、2	
		中国马克思主义与当代		2	32	1	
		马克思主义经典著作选读		1	16	2	
	专业 必修 课	专业 基 础 课	化学前沿与挑战	3	48	1	
			现代化学研究方法学	3	48	1	
			现代有机合成	3	48	1	
		专业 方 向 课	01 有机超分子化学前沿理论专题研讨	2	32	2	
			02 金属有机-多酸化学前沿理论专题研讨	2	32	2	
			03 应用有机化学理论方法专题研讨	2	32	2	
	选修 课	科技论文写作与学术规范		2	32	2	
		学术报告与讨论		2	32	2	
		有机化学论文选读		2	32	2	

阅读参考书目

一、中文

- 1.汪秋安:《高等有机化学》(第三版),化学工业出版社,2015年。
- 2.吴毓林:《现代有机合成化学》(第二版),科学出版社,2006年。
- 3.林国强:《手性合成--不对称反应及其应用》(第二版),科学出版社,2001年。
- 4.黄宪:《新编有机合成化学》,化学化工出版社,2002年。
- 5.安德森、本戴尔、古兰德沃特:《有机波谱分析》(唐川江译),中国纺织出版社,2007年。
- 6.张华:《现代有机波谱分析》,化学工业出版社,2005年。
- 7.宁永成:《有机波谱学谱图解析》,科学出版社,2010年。
- 8.宁永成:《有机化合物结构鉴定与有机波谱分析》,科学出版社,2002年。
- 9.李润卿:《有机结构波谱分析》,天津大学出版社,2002年。
- 10.Kiemle, D. J., Webster, F. X., Silverstein R. M.,《有机化合物的波谱解析》(药明康德新药开发有限公司分析部译),华东理工大学出版社,2007年。
- 11.黄春辉、李富友:《光电功能超薄膜》,北京大学出版社,2001年。
- 12.黄春辉、李富友、黄维:《有机电致发光材料与器件导论》,复旦大学出版社,2005年。
- 13.孙家跃、杜海燕:《固体发光材料》,化学工业出版社,2003年。
- 14.杨柏、吕长利、沈家骢:《高性能聚合物光学材料》,化学工业出版社,2005年。
- 15.董建华:《高分子科学前沿与进展》,科学出版社,2006年。
- 16.朱道本:《功能材料化学进展》,化学工业出版社,2005年。
- 17.禹熙权:《先进功能材料(英文版)》,浙江大学出版社,2011年。
- 18.李弘:《先进功能材料》,化学工业出版社,2011年。
- 19.江雷、冯琳:《仿生智能纳米界面材料》,化学工业出版社,2007年。
- 20.王正品、张路、要玉宏:《金属功能材料》,化学工业出版社,2004年。
- 21.张寒琦:《光谱化学分析》,吉林大学出版社,1996年。
- 22.阿伦.J.巴德:《电化学方法--原理和应用》,化学工业出版社,2005年。
- 23.李启隆、胡劲波:《电分析化学》,北京师范大学出版社,2007年。
- 24.傅若农:《色谱分析概论》,化学工业出版社,2000年。
- 25.刘虎威:《气象色谱方法及应用》,化学工业出版社,2000年。
- 26.于世林:《高效液相色谱方法及应用》,化学工业出版社,2000年。
- 27.刘世宏、王当愁、潘承璜:《X射线光电电子能谱分析》,科学出版社,1988年。
- 28.刘文西、黄孝瑛、陈玉如:《材料结构电子显微分析》,天津大学出版社,1989年。
- 29.叶继元,《学术规范通论》,华东师范大学出版社,2005年。
- 30.杨玉圣、张保生:《学术规范读本》,河南大学出版社,2004年。
- 31.Carole Slade:《如何写研究论文与学术报告》,外语教学与研究出版社,2011年。
- 32.杨玉圣、张保生:《学术规范导论》,高等教育出版社,2004年。
- 33.李光玉、黄发玉:《科学研究与道德》,华中工学院出版社,1987年。
- 34.叶继元:《学术规范通论》,华东师范大学出版社,2005年。
- 35.秦荻辉:《科技英语写作高级教程》,西安电子科技大学出版社,2012年。
- 36.赖茂生:《科技文献检索》,北京大学出版社,2010年。

37. M. T. Pope: 《杂多和同多金属氧酸盐》(王恩波等译), 吉林大学出版社, 1991 年。
38. 王恩波等: 《多酸化学导论》, 化工出版社, 1998 年。
39. 王恩波等: 《多酸化学概论》, 东北师大出版社, 2009 年。
40. 牛景杨、王静平: 《杂多化合物概论》, 河南大学出版社, 2000 年。

二、外文

1. Fuhrhop, J., Penzlin, G., Organic Synthesis, 2nd Ed, New York: VCH, 1994.
2. Corey, E. J., Cheng, X.-M., The Logic of Chemical Synthesis, New York: John Wiley & Sons, 1989.
3. Warren, S., Organic Synthesis, The Disconnection Approach, Chichester, Wiley, 1978.
4. Corey, E. J., General Methods for the Construction Complex Molecules, Pure & Appl. Chem. 1967, 14, 19.
5. Anand, N., Bindra, J. S., Ranganathan, S., Art in organic Synthesis, 2nd Ed, New York: John Wiley & Sons, 1988.
6. Theodora W. Greene., Peter G. M. Wuts, Protective Group Organic Synthesis, 3rd Ed, New York: John Wiley & Sons, 1980.
7. Anderson, R. J., Bendell, D. J., Groundwater, P. W., Organic Spectroscopic Analysis, Royal Society of Chemistry, Cambridge. 2004.
8. Tang, C. W., Vanslyke, S. A., Appl. Phys. Lett., 1987, 51, 913.
9. Buono-core, G. E., Li, H., Marciniak, B., Coord. Chem. Rev. 1990, 99, 55.
10. Yu, L. M., Ying, L. M., Zhao, X. S., Xia, W. S., Huang, C. H., Progress in Natural Science, 1997, 7, 692.
11. Sun, P. P., Duan, J. P., Shi, H. T., Cheng, C. H., Appl. Phys. Lett. 2000, 81, 792.
12. Kleinerman, M. J., Chem. Phys. 1969, 51, 2370.
13. Young, J. M., Opt World, 1989, 18(124), 10.
14. Beecroft, L. L., Ober, C. K., Chem. Mater. 1997, 9, 1302.
15. Sanchez, C., Lebeau, B., Chaput, F., Boilot, J. P., Adv. Mater. 2003, 15, 1969.
16. Cotton, F. A., Wilkinson, G. et al, Adv. Inorg. Chem., John Wiley & Sons, New York, 1999.
17. Wood, Y. J. S., Inorg. Chem., 1968, 7, 852.
18. Lever, A. B. P., J. Chem. Educ., 1968, 45, 711.
19. Larrabee, J. A., Alessi, C. M., Asiedu, E. T. et al., J. Am. Chem. Soc., 1997, 119, 4182.
20. Band, Y., Nagakura, S., Inorg. Chem., 1968, 7, 893.
21. Damrauer, N.H., McCusker, J. K., J. Phys. Chem. A, 1999, 103, 8440.
22. Fuhrhop, J., Penzlin, G., Organic Synthesis, 2nd Ed, New York: VCH, 1994.
23. Corey, E. J., Cheng, X. -M., The Logic of Chemical Synthesis, New York: John Wiley & Sons, 1989.
24. Warren, S., Organic Synthesis, The Disconnection Approach, Chichester, Wiley, 1978.
25. Corey, E. J., General Methods for the Construction Complex Molecules, Pure & Appl. Chem. 1967, 14, 19.
26. Anand, N., Bindra, J. S., Ranganathan, S., Art in organic Synthesis, 2nd Ed, New

- York: John Wiley & Sons, 1988.
27. Pope, M. T., *Heteropoly and Isopoly Oxometalates*, Springer-Verlag, 1983.
 28. Pope, M. T., Muller, A., *Polyoxometalate Chemistry: From Topology Via Self-Assembly to Applications*, The Netherlands, 2001.
 29. Yamase, T., Pope, M. T., *Polyoxometalate Chemistry for Nano-Composite Design*, The Netherlands, 2002.
 30. Dolbecq, A., Dumas, E., Mayer, C. R., Mialane, P., *Chem. Rev.* 2010, 110, 6009.

学术学位博士

物理化学专业培养方案

一、培养目标

掌握坚实、宽广的化学基础知识和技能，深入系统掌握物理化学的专门知识、理论和研究方法，了解其现状和发展趋势。具有良好的科学素养和独立开展科学研究的能力，并在所从事的研究领域内取得创新成果。有适应交叉学科领域研究的能力，有强烈的创新意识。至少掌握一门外语，能用英语熟练阅读本专业的文献资料，具有良好的写作能力和进行国际学术交流的能力。熟练运用计算机与现代信息工具。

二、专业及研究方向

代码	研究方向名称	简要说明
01	理论与计算化学	理论和计算化学中的概念、方法和理论及其发展应用。
02	催化化学	纳米金属及金属氧化物结构和形貌调控，及其在催化合成精细化学品中的应用。

三、学制与学习年限

全日制学术型博士研究生基本学制为 4 年（直博生 5 年），最长学习年限为 8 年。

四、培养方式

博士研究生的培养实行导师组领导下的导师负责制，坚持导师负责制与导师组集体培养相结合，系统、前沿的理论学习与广泛的社会实践相结合，注重因材施教，注重博士生思想政治教育。

博士生导师主要负责业务学习、学位论文选题和论文质量把关等方面的全面指导，指导小组的其他成员或辅助导师侧重参与课题的论证和关键技术问题等方面的指导。博士生指导小组由本学科或相关学科的不少于 2 名高级职称的专家组成。

导师应根据本学科培养方案的要求，结合博士生的基础和特长，在博士生入学后一个月内制订出博士生个人的培养计划，对研究方向、课程学习、学位论文工作的各个环节要求和进展做出具体规定。导师要全面关心博士生的成长，既教书又育人。

五、课程设置与学分

课程设置分为必修课和选修课，包括公共必修课、专业基础课、专业方向课、专业选修课。物理化学专业博士研究生毕业须达到总学分 20 分，其中课程部分 20 学分，公共必修课、专业基础课、专业方向课学分分别为 7 学分、9 学分、2 学分。

六、学术研讨与学术报告

博士研究生在学期间参加学术活动是培养过程中巩固基础、提高质量的必要环节。为培养研究生的学术研究能力和语言表达能力，营造良好的学术氛围，提高研究生培养质量，丰富学院学术文化生活，研究生在校期间参加各种类型的学术活动不得少于 10 次。研究生学术报告包括自己作专题学术报告、参加学术报告会、前沿讲座以及各种专题研讨班等。

七、中期考核

为确保博士研究生的培养质量，博士生在入学后第四学期初，进行一次中期考核，学院学位评定分委员会要对博士研究生进行一次全面考核，内容包括思想品德和治学态度、课程学习、科研和工作能力等。

八、学位（毕业）论文

（一）论文开题

1. 在导师指导下，在广泛调查研究、阅读文献资料、弄清主攻方向的前沿成果和发展动态的基础上，博士生应在入学后第三学期第五周至第四学期第十周期间完成学位论文开题报告并参加博士论文开题报告会。

2. 开题报告要就以下内容进行认真论证：选题的背景意义、国内外研究动态及发展趋势、主要研究内容、拟采取的技术路线及研究方法、预期成果以及进度计划等。

3. 评审要求

（1）文献综述（具有独立搜集资料和分析、综合研究的能力，论述精辟、全面）；

（2）学术见解（把握学科前沿，学术思想开阔，选题新颖、合理，重点准确，预期目标得当）；

（3）实验研究方案（所选研究方法先进、适当，技术路线严密，措施得当，掌握技术资料准确，对可能遇到的问题分析合乎逻辑，有预见性，工作安排合理、紧凑）；

（4）表达能力（表述清楚、准确，能正确回答问题）。

（二）学位论文

博士学位论文是博士生培养质量和学术水平的集中反映，应在导师指导下由博士生独立完成。一般在入学后第三学期提出论文题目，经导师同意可开始收集材料和撰写。

学位论文工作是培养博士研究生提高创造能力和竞争能力的主体，是博士生学习阶段的中心环节。博士生应在不晚于入学后的第六学期，以自己的研究课题和发表的论文为基础，撰写博士论文，争取具有较高的学术水平。具体要求如下：

（1）博士学位论文应是系统完整的学术论文，应在科学上或专门技术上作出创新性学术成果的基础上总结和撰写。其内容和写作水平应能反映出博士生已经掌握了坚实宽广的基础理论和系统深入的专门知识，具备了独立从事教学或科学研究工作的能力。

（2）学位论文写作是博士生的工作能力和科学素质培养的重要环节。送审和申请学位时递交的论文正式文本必须达到论述严谨、表达简练、文字通顺流畅。论文的结构、版式、公式和图表的格式、专业术语和计量单位的使用、参考文献引用格式、以及印刷（打印）和装订等均必须全面符合校研究生院颁布的《博士学位论文写作及答辩指南》中所规定的规范。文字质量差或格式不符合规范要求的博士学位论文，学位评定分委员会有权拒绝受理其作者的学位申请。

（3）博士生在学位论文工作中必须严格恪守科学研究的道德规范，坚决杜绝弄虚作假、抄袭剽窃等丑恶行为。违规者一经查实，取消其申请答辩和学位评定资格并按研究生学籍管理的有关规定从严处理。已通过的答辩一律宣告无效，已授的博士学位一律予以撤消。

（4）学位论文的实验工作期限及总完成期限、学位论文送审和答辩程序按学校有关规定严格执行。

九、附则

1. 本方案自 2023 级开始执行。

2. 如有与学校规定相悖之处，遵照学校相关规定执行。未尽事宜以学校研究生院相关文件为依据，由研究生和导师提交有关申请，由学院学位委员会审核后报送研究生院审批。

《课程设置与教学计划表》

学院（中心）：化学化工学院 学科、专业：物理化学

研究方向：01. 理论与计算化学、 02. 催化化学。

课程类别		课程名称		学分	学时	开课学期	备注		
必修 课	公共必修课		公共外语		4	64	1、2		
			中国马克思主义与当代		2	32	1		
			马克思主义经典著作选读		1	16	2		
	专业必修课	专业基础课		化学前沿与挑战		3	48	1	
				现代化学研究方法学		3	48	1	
				高等量子化学		3	48	1	
		专业方向课		01	理论化学前沿领域专题研讨	2	32	2	
				02	催化化学前沿领域专题研讨	2	32	2	
选修课			科技论文写作与学术规范		2	32	2		
			学术报告与讨论		2	32	2		
			物理化学论文选读		2	32	2		

阅读参考书目

一、中文

1. 陈正隆、徐为人、汤立法:《分子模拟的理论与实践》, 化学工业出版社, 2007 年。
2. 帅志刚、邵久书:《理论化学原理与应用》, 科学出版社, 2008 年。
3. 孙家钟、李荣生:《催化作用基础》, 科学出版社, 1988 年。
4. 唐敖庆、杨忠志、李前树:《量子化学》, 科学出版社, 1982 年。
5. 王建祺、杨忠志:《紫外光电子能谱学》, 科学出版社, 1988 年。
6. 魏谄、王凤山、黄东律:《近代结构分析方法》, 吉林大学出版社, 1989 年。
7. 徐光宪、黎乐民、王德民、陈敏伯:《量子化学-基本原理和从头计算法》, 科学出版社, 2007 年。
8. 徐光宪、王祥云:《物质结构》, 科学出版社, 2010 年。
9. 杨忠志、叶元杰、唐敖庆:《大分子体系的量子化学》, 吉林大学出版社, 2005 年。

二、外文

1. Ames, W., Pantazis, D. A., Krewald, V., Cox, N., Messinger, J., Lubitz, W., Neese, F., Theoretical Evaluation of Structural Models of the S2 State in the Oxygen Evolving Complex of Photosystem II: Protonation States and Magnetic Interactions, *J. Am. Chem. Soc.*, 2011, 133, 19743-19757.
2. Amslyn, E. V., Dougherty, D. A., *Modern Physical Organic Chemistry*. University Science Books: USA, 2004.
3. Andersen, H. C., Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature, *J Chem Phys*, 1980, 72, 2384-2393.
4. Bader, R. F. W., Carroll, M. T., Cheeseman, J. R., Chang, C., Properties of atoms in molecules: Atomic volumes, *J. Am. Chem. Soc.*, 1987, 109, 7968-7979.
5. Ball, P., Water as an Active Constituent in Cell Biology, *Chem. Rev.*, 2008, 108, 74-108.
6. Berg, J. M., Tymoczko, J. L., Stryer, L., *Biochemistry*, seventh edition ed. Freeman W. and Company: New York, 2012.
7. Best, R. B., Atomistic molecular simulations of protein folding, *Curr. Opin. Chem. Biol.*, 2012, 22, 52-61.
8. Brown, I. D., View of Lone Electron Pairs and Their Role in Structural Chemistry, *J. Phys. Chem. A*, 2011, 115, 12638-12645.
9. C ádenas, C., Rabi, N., Ayers, P. W., Morell, C., Jaramillo, P., Fuentealba, P., Chemical Reactivity Descriptors for Ambiphilic Reagents: Dual Descriptor, Local Hypersoftness, and Electrostatic Potential, *J. Phys. Chem. A*, 2009, 113, 8660-8667.
10. Chen, L., Jiang, T., Lin, J., Cai, C., Toroid Formation through Self-Assembly of Graft Copolymer and Homopolymer Mixtures: Experimental Studies and Dissipative Particle Dynamics Simulations, *Langmuir*, 2013, 29, 8417-8426.
11. Chen, S.-L., Zhao, D.-X., Yang, Z.-Z., An Estimation Method of Binding Free Energy In Terms Of ABEEMsp/MM and Continuum Electrostatics Fused Into LIE Method, *J*

- Comput Chem*, 2011, 32, 338-348.
12. Chernov, A. A., Coppens, P., Desiraju, G. R., Drenth, J., Glazer, A. M., Glusker, J. P., Helliwell, J. R., *The Weak Hydrogen Bond*. Oxford University Press: Oxford, New York, 1999.
 13. Cornell, W. D., Cieplak, P., Bayly, C. I., Gould, I. R., Merz, K. M., Ferguson, D. M., Kollman, P. A., A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic acids, and organic molecules, *J. Am. Chem. Soc.*, 1995, 117, 5179-5197.
 14. Cox, N., Messinger, J., Reflections on substrate water and dioxygen formation, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Bioenergetics*, 2013, 1827, 1020-1030.
 15. Cox, N., Pantazis, D. A., Neese, F., Lubitz, W., Biological water oxidation, *Acc. Chem. Res.*, 2013, 46, 1588-1596.
 16. Cramer, C. J., *Essentials of Computational Chemistry - Theories and Models*, second edition ed. JOHN WILEY&SONS, LTD: England, West Sussex, 2002.
 17. Dahlke, E. E., Orthmeyer, M. A., Truhlar, D. G., Assessment of Multicoefficient Correlation Methods, Second-Order Møller-Plesset Perturbation Theory, and Density Functional Theory for H₃O⁺ (H₂O)_n (n= 1-5) and OH-(H₂O)_n (n= 1-4), *J. Phys. Chem. B*, 2008, 112, 2372- 2381.
 18. Derouane, E. G., Fripiat, J. G., Ballmoos, R. V., Quantum mechanical calculations on molecular sieves. 2. Model cluster investigation of silicoaluminophosphates, *J. Phys. Chem.*, 1990, 94, 1687-1692.
 19. Fuentealba, P., Florez, E., Tiznado, W., Topological analysis of the Fukui function, *J. Comput. Theory. Chem.*, 2010, 6, 1470-1478.
 20. Gong, L. D., Yang, Z. Z., Investigation of the Molecular Surface Area and Volume: Defined and Calculated by the Molecular Face Theory, *J. Comput. Chem.*, 2010, 31, 2098–2108.
 21. Groot, R. D., Warren, P. B., Dissipative particle dynamics: bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation, *J Chem Phys*, 1997, 107, 4423.
 22. Hehre, W. J.: *A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations*. Wavefunction Inc.: Irvine, CA, 2003.
 23. Hoffmann, R., Shaik, S., Hiberty, P. C., A conversation on VB vs MO theory: a never-ending rivalry?, *Acc. Chem. Res.*, 2003, 36, 750-756.
 24. Hoover, W. G., Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions, *Phys. Rev. A*, 1985, 31, 1695-1697.
 25. Huzinaka, S., Sakai, Y., Miyoshi, E., Narita, S., Extended Mulliken electron population analysis, *J Chem Phys*, 1990, 93, 3319-3325.
 26. Jakalian, A., Bush, B., Jack, D. B., Bayly, C. I., Fast, efficient generation of high-quality atomic charges. AM1-BCC model: I. method, *J. Comput. Chem.*, 2000, 21, 132-146.
 27. Jeffrey, G. A., *An Introduction to Hydrogen Bond*. Oxford University Press: Oxford, New York, 1997.
 28. Jurečka, P., Leszczyński, J., Hobza, P., Nature of nucleic acid-base stacking: nonempirical ab initio and empirical potential characterization of 10 stacked base dimers. comparison of stacked and H-bonded base pairs, *J. Phys. Chem. B*, 1996, 100, 5590-5596.

29. Jurečka, P., Nachtigall, P., Hobza, P., RI-MP2 calculations with extended basis sets-a promising tool for study of H-bonded and stacked DNA base pairs, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2001, 3, 4578-4582.
30. Jurečka, P., Šponer, J., Černý, J., Hobza, P., Benchmark database of accurate (MP2 and CCSD(T) complete basis set limit) interaction energies of small model complexes, DNA base pairs, and amino acid pairs, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2006, 8, 1985-1993.
31. Jurečka, P., Šponer, J., Hobza, P., Potential energy surface of the cytosine dimer: MP2 complete basis set limit interaction energies, CCSD(T) correction term, and comparison with the AMBER force field, *J. Phys. Chem. B*, 2004, 108, 5466-5471.
32. Kaminski, G. A., Friesner, R. A., Tirado-Rives, J., Jorgensen, W. L., Evaluation and Reparametrization of the OPLS-AA Force Field for Proteins via Comparison with Accurate Quantum Chemical Calculations on Peptides, *J. Phys. Chem. B*, 2001, 105, 6474-6487.
33. Kessel, A., Ben-Tal, N., *Introduction to Proteins, Structure, Function, and Motion*. Chapman and Hall CRC Mathematical and Computational Biology Series: London, 2011.
34. Leach, A. R., *Molecular Modeling - Principles and Applications*, second edition ed. Pearson Education Limited, Essex: England, 2001.
35. Levine, I. N., *Quantum Chemistry*, Fifth edition ed. Prentice Hall International. Inc. : New York, 2000.
36. Li, X., Guo, J., Liu, Y., Liang, H., Microphase separation of diblock copolymer poly(styrene-*b*-isoprene): A dissipative particle dynamics simulation study, *J Chem Phys*, 2009, 130, 074908.
37. Li, Y., Wang, C. S., Rapid evaluation of the binding energies between peptide amide and DNA base, *J. Comput. Chem.*, 2011, 32, 2765-2773.
38. Liu, C., Zhao, D.-X., Yang, Z.-Z., Direct evaluation of individual hydrogen bond energy in situ in intra- and intermolecular multiple hydrogen bonds system, *J. Comput. Chem.*, 2012, 33, 379-390.
39. London, F., The general theory of molecular forces, *Transactions of the Faraday Society*, 1937, 33, 8b-26.
40. Medders, G. R., Babin, V., Paesani, F., A critical assessment of two-body and three-body interactions in water, *J Chem Phys*, 2013, 9, 1103-1115.
41. Mohan, N., Suresh, C. H., A Molecular Electrostatic Potential Analysis of Hydrogen, Halogen, and Dihydrogen Bonds, *J. Phys. Chem. A*, 2014, 118, 1697-1705.
42. Mortier, W. J., Genechten, K. V., Gasteiger, J., Electronegativity equalization: application and parametrization, *J. Am. Chem. Soc.*, 1985, 107, 829-835.
43. Navarro, M. P., Ames, W. M., Nilsson, H., Lohmiller, T., Pantazis, D. A., Rapatskiy, L., Cox, N., Ammonia binding to the oxygen-evolving complex of photosystem II identifies the solvent-exchangeable oxygen bridge (μ -oxo) of the manganese tetramer, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2013, 110, 15561-15566.
44. Nosé S., A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods, *J Chem Phys*, 1984, 81, 511-519.
45. Novoa, J. J., Mota, F., Perez del Valle, C., Planas, M., Structure of the First Solvation Shell of the Hydroxide Anion. A Model Study Using OH (H₂O)_n (n=4, 5, 6, 7, 11, 17)

- Clusters, *J. Phys. Chem. A*, 1997, *101*, 7842-7853.
46. P.J. D., 1.26 - Solvents and Ionic Liquids. In *Comprehensive Coordination Chemistry II*; Editors-in-Chief: , J. A. M., Meyer, T. J., Eds.; Pergamon: Oxford, 2003; pp 557-566.
 47. Pantazis, D. A., Ames, W., Cox, N., Lubitz, W., Neese, F., Two Interconvertible Structures that Explain the Spectroscopic Properties of the Oxygen-Evolving Complex of Photosystem II in the S2 State, *Angew. Chem. In. Ed.*, 2012, *51*, 9935 -9940.
 48. Parrinello, M., Rahman, A., Crystal structure and pair potentials: A molecular-dynamics study, *Phys. Rev. Lett.*, 1980, *45*, 1196-1198.
 49. Rapatskiy, L., Cox, N., Savitsky, A., Ames, W. M., Sander, J., Nowaczyk, M. M., Lubitz, W., Detection of the water-binding sites of the oxygen-evolving complex of photosystem II using W-band ¹⁷O electron-electron double resonance-detected NMR spectroscopy, *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, *134*, 16619-16634.
 50. Rapp é A. K., Casewit, C. J., *Molecular Mechanics Across Chemistry*. University Science Books: Sausalito, CA, 1997.
 51. Ren, P., Ponder, J. W., Polarizable atomic multipole water model for molecular mechanics simulation, *J. Phys. Chem. B*, 2003, *107*, 5933-5947.
 52. Rezáč, J., Riley, K. E., Hobza, P., S66: A well-balanced database of benchmark interaction energies relevant to biomolecular structures, *J. Chem. Theory Comput.*, 2011, *7*, 2427-2438.
 53. Riley, K., Hobza, P., Assessment of the MP2 Method, along with Several Basis Sets, for the Computation of Interaction Energies of Biologically Relevant Hydrogen Bonded and Dispersion Bound Complexes, *J. Phys. Chem. A*, 2007, *111*, 8257-8263.
 54. Rutledge, L. R., Campbell-Verduyn, L. S., Hunter, K. C., Wetmore, S. D., Characterization of nucleobase-amino acid stacking interactions utilized by a DNA repair enzyme, *J. Phys. Chem. B*, 2006, *110*, 19652-19663.
 55. Sagui, C., Darden, T., Multigrid methods for classical molecular dynamics simulations of biomolecules, *J Chem Phys*, 2001, *114*, 6578-6591.
 56. Sinnokrot, M. O., Sherrill, C. D., Highly accurate coupled cluster potential energy curves for the benzene dimer: sandwich, T-shaped, and parallel-displaced configurations, *J. Phys. Chem. A*, 2004, *108*, 10200-10207.
 57. Sinnokrot, M. O., Valeev, E. F., Sherrill, C. D., Estimates of the ab initio limit for $\pi\pi$ interactions: the benzene dimer, *J. Am. Chem. Soc.*, 2002, *124*, 10887-10893.
 58. Smiechowski, M., Stangret, J., Hydroxide Ion Hydration in Aqueous Solutions, *J. Phys. Chem. A*, 2007, *111*, 2889-2897.
 59. Stone, A. J., Intermolecular Potentials, *Science*, 2008, *321*, 787-789.
 60. Sun, C. L., Jiang, X. N., Wang, C. S., An analytic potential energy function for the amide-amide and amide-water intermolecular hydrogen bonds in peptides, *J. Comput. Chem.*, 2009, *30*, 2567-2575.
 61. Tentscher, P. R., Arey, J. S., On the Nature of Interactions of Radicals with Polar Molecule, *J. Phys. Chem. A*, 2013, *117*, 12560-12568.
 62. Torrent-Sucarrat, M., Proft, F. D., Geerlings, P., Ayers, P. W., Do the Local Softness and Hardness Indicate the Softest and Hardest Regions of a Molecule? , *Chem. Eur. J.*, 2008, *14*, 8652-8660.

63. van Gunsteren, W. F., Bakowies, D., Baron, R., Chandrasekhar, I., Christen, M., Daura, X., Gee, P., Yu, H. B., Biomolecular Modeling: Goals, Problems, Perspectives, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2006, 45, 4064-4092.
64. Vegiri, A., Shevkunov, S. V., Hydration shell structure of the OH⁻ (H₂O)_n=1-15 clusters from a model potential energy function, *J Chem Phys*, 2000, 113, 8521-8530.
65. Wang, C. S., Yang, Z. Z., Atom-bond electronegativity equalization method. II. Lone-pair electron model, *J Chem Phys*, 1999, 110, 6189-6197.
66. Wang, J., Cieplak, P., Kollman, P. A., How well does a restrained electrostatic potential (RESP) model perform in calculating conformational energies of organic and biological molecules?, *J. Comput. Chem.*, 2000, 21, 1049-1074.
67. Wassenaar, T. A., Ingólfsson, H. I., Prieß, M., Marrink, S. J., Schafer, L. V., Mixing MARTINI: Electrostatic Coupling in Hybrid Atomistic-Coarse-Grained Biomolecular Simulations, *J. Phys. Chem. B*, 2013, 117, 3516-3530.
68. Wendler, K., Thar, J., Jahn, S., Kirchner, B., Estimating the Hydrogen Bond Energy, *J. Phys. Chem. A*, 2010, 114, 9529-9536.
69. Wilson, M. S., Ichikawa, S., Comparison between the geometric and harmonic mean electronegativity equilibration techniques, *J. Phys. Chem.*, 1989, 93, 3087-3089.
70. Wu, Y., Yang, Z. Z., Atom-Bond Electronegativity Equalization Method Fused into Molecular Mechanics. II. A Seven-Site Fluctuating Charge and Flexible Body Water Potential Function for Liquid Water, *J. Phys. Chem. A*, 2004, 108, 7563-7576.
71. Xantheas, S. S., Theoretical Study of Hydroxide Ion- Water Clusters, *J. Am. Chem. Soc.*, 1995, 117, 10373-10380.
72. Xu, S., Liu, C., Zhao, D.-X., Gong, L.-D., Yang, Z.-Z., Search of the Conformations of Val-dipeptide and Val-tripeptide by Ab Initio method and ABEEMσπ Polarizable Force Field, *Chem Phys Lett*, 2015, 618, 147-152.
73. Yang, Z. Z., Cui, B. Q., Atomic Charge Calculation of Metallobiomolecules in Terms of the ABEEM Method, *J. Chem. Theory Comput.*, 2007, 3, 1561-1568.
74. Yang, Z. Z., Ding, Y. L., Zhao, D. X., Insight into Markovnikov Reactions of Alkenes in Terms of Ab Initio and Molecular Face Theory, *ChemPhysChem*, 2008, 9, 2379-2389.
75. Yang, Z. Z., Ding, Y. L., Zhao, D. X., Theoretical analysis of gas-phase front-side attack identity S_N2(C) and S_N2(Si) reactions with retention of configuration, *J. Phys. Chem. A*, 2009, 113, 5432-5445.
76. Yang, Z. Z., Li, X., Ion Solvation in Water from Molecular Dynamics Simulation with the ABEEM/MM Force Field, *J. Phys. Chem. A*, 2005, 109, 3517-3520.
77. Yang, Z. Z., Li, X., Molecular-dynamics simulations of alkaline-earth metal cations in water by atom-bond electronegativity equalization method fused into molecular mechanics, *J Chem Phys*, 2005, 123, 094507.
78. Yang, Z. Z., Liu, S. B., Wang, Y. A., Uniqueness and asymptotic behavior of the local kinetic energy, *Chem Phys Lett*, 1996, 258, 30-36.
79. Yang, Z. Z., Qian, P., A study of N-methylacetamide in water clusters: Based on atom-bond electronegativity equalization method fused into molecular mechanics, *J Chem Phys*, 2006, 125, 064311.
80. Yang, Z. Z., Wang, C. S., Atom-Bond Electronegativity Equalization Method. 1.

- Calculation of the Charge Distribution in Large Molecules, *J. Phys. Chem. A*, 1997, 101, 6315-6321.
81. Yang, Z. Z., Wu, Y., Zhao, D. X., Atom-bond electronegativity equalization method fused into molecular mechanics. I. A seven-site fluctuating charge and flexible body water potential function for water clusters, *J Chem Phys*, 2004, 120, 2541-2557.
 82. Yang, Z. Z., Zhang, Q., Study of Peptide Conformation in Terms of the ABEEM/MM Method, *J. Comput. Chem.*, 2006, 27, 1-10.
 83. Yesylevskyy, S. O., Schafer, L. V., Sengupta, D., Marrink, S. J., Polarizable Water Model for the Coarse-Grained MARTINI Force Field, *PLoS computational biology*, 2010, 6, e1000810.1-e1000810.17.
 84. Yu, L., Yang, Z. Z., Study on structures and properties of ammonia clusters (NH₃)_n (n=1-5) and liquid ammonia in terms of ab initio method and atom-bond electronegativity equalization method ammonia-8P fluctuating charge potential model, *J Chem Phys*, 2010, 132, 174109.
 85. Zhang, I. Y., Wu, J., Xu, X., Extending the reliability and applicability of B3LYP, *Chem. Commun.*, 2010, 46, 3057-3070.
 86. Zhang, M. B., Yang, Z. Z., Computational study on the reaction CH₂CH₂+F →CH₂CHF+H, *J. Phys. Chem. A*, 2005, 109, 4816-4823.
 87. Zhang, Q., Yang, Z. Z., An investigation of alkane conformations based on the ABEEM/MM model, *Chem Phys Lett*, 2005, 403, 242-247.
 88. Zhao, D. X., Liu, C., Wang, F. F., Yu, C. Y., Gong, L. D., Liu, S. B., Yang, Z. Z., Development of a Polarizable Force Field Using Multiple Fluctuating Charges per Atom, *J Chem Theory Comput*, 2010, 6, 795-804.
 89. Zhao, D.-X., Yu, L., Gong, L.-D., Liu, C., Yang, Z.-Z., Calculating solvation energies by means of a fluctuating charge model combined with continuum solvent model, *J Chem Phys*, 2011, 134, 194115.
 90. Zhao, Y., You, L. Y., Lu, Z. Y., Sun, C. C., Dissipative particle dynamics study on the multicompartment micelles self-assembled from the mixture of diblock copolymer poly(ethyl ethylene)-block-poly(ethylene oxide) and homopolymer poly(propylene oxide) in aqueous solution, *Polymer*, 2009, 50, 5333-5340.