

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.....	3
070303 有机化学.....	14
070304 物理化学.....	21

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		7	
	专业 必修 课	专业基础课	9	
		专业方向课	2	
选修课			2	
总学分			20	

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
A	无机材料化学	设计合成具有特定结构的新型功能配位聚合物材料，并研究其结构、性能及其相互关系。
B	无机固体化学	开发新型功能固体无机材料，研究组成、结构与其光电催化性质的关系。

三、学制与学习年限

全日制博士研究生攻读博士学位，脱产学习学制为 3 年；在职攻读学制为 4 年。因特殊原因需延长学习年限者需由本人提出书面报告，所在学院审查同意，上报研究生院审批，学习年限最长不超过 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 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、选修课分别为 7 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 2020 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。未尽事宜由学院学位评定分委会负责解释。

《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：A.无机材料化学、B.无机固体化学。

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	
			无机化学理论方法专题研讨		3	48	1	
		专业方向课	A	配位超分子结构化学新进展	2	32	2	
			B	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

中文:

1. 徐志固:《现代配位化学》, 化学工业出版社, 1987 年版。
2. 中国化学会:《无机化学命名原则》, 科学出版社, 1980 年。
3. 游效曾:《配位化学的结构和性质》, 科学出版社, 1992 年。
4. 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。
5. 游效曾:《分子材料—光电功能化合物》, 上海科技出版社, 2000 年。
6. 徐如人:《无机合成化学》, 高等教育出版社, 1990 年。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。
7. 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。
8. 计亮年, 英庭焕:《生物无机化学导论》, 中山大学出版社, 1991 年。
9. 杨频:《生物无机化学导论》, 西安交通大学出版社, 1991。
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. 黄春辉:《稀土配位化学》, 科学出版社, 1987 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. 陈慧兰, 余宝源:《理论无机化学》高等教育出版社, 1989 年。
14. 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。
15. 戴安邦:《配位化学》, 科学出版社, 1987 年。
16. 罗勤慧:《配位化学》, 江苏科技出版社, 1984 年。
17. 刘祁涛:《配位化学》, 辽宁大学出版社, 1986 年。
18. 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。
19. 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。
20. 徐如人、庞文琴:《无机合成与制备化学》, 高等教育出版社, 2001 年。
21. 刘海涛、杨邴、张树军、林蔚:《无机材料合成》, 化学工业出版社, 2003 年。
22. 林建华、荆西平:《无机材料化学》, 北京大学出版社, 2006 年。
23. 曾人杰:《无机材料化学》, 厦门大学出版社, 2001 年。
24. 张克立:《固体无机化学》, 武汉大学出版社, 2005 年。
25. 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。
26. 于吉红、闫文付:《纳米孔材料化学》, 科学出版社 2013 年。
27. 赵继周:《高等无机化学》, 北京师范大学出版社, 1985 年。
28. 麦松威、周公度、李伟基:《高等无机结构化学》, 北京大学出版社、香港大学出版社, 2001 年。
29. 陈慧兰、余宝源:《理论无机化学》, 高等教育出版社, 1989 年。
30. 章慧:《配位化学原理及应用》, 化学工业出版社, 2008 年。
31. 金斗满、朱文祥:《配位化学研究方法》, 科学出版社, 1996 年。
32. 王恩波、李阳光、陆颖、王新龙:《多酸化学概论》, 东北师范大学出版社, 2009 年。
33. 介万奇:《晶体生长原理与技术》, 科学出版社, 2010 年。
34. 黄新民, 解挺:《材料分析测试方法》, 国防工业出版社, 2006 年。

外文:

1. M. D. Allendorf, C. A. Bauer, R. K. Bhaktaa and R. J. T. Houka, Luminescent metal—organic frameworks, Chem. Soc. Rev., 2009, 38, 1330—1352.
2. Zhichao Hu, Benjamin J. Deibert and Jing Li, Luminescent metal—organic frameworks for chemical sensing and explosive detection, Chem. Soc. Rev., 2014, 43, 5815—5840.
3. Anastasia D. Pournara, Antigoni Margariti, Georgios D. Tarlas, Andreas Kourtellaris, Valeri

- Petkov, Christos Kokkinos, Anastasios Economou, Giannis S. Papaefstathiou and Manolis J. Manos, A Ca^{2+} MOF combining highly efficient sorption and capability for voltammetric determination of heavy metal ions in aqueous media, *J. Mater. Chem. A*, 2019, 7, 15432–15443.
4. Yifang Zhao, Meng-Yan Wan, Jian-Ping Bai, Heng Zeng, Weigang Lu, Dan Li, pH-modulated luminescence switching in a Eu-MOF: rapid detection of acidic amino acids, *J. Mater. Chem. A*, 2019, 7, 11127–11133.
 5. Junmin Liu, Yu Ye, Xiaodong Sun, Bing Liu, Guanghua Li, Zhiqiang Liang and Yunling Liu, A multifunctional Zr(IV)-based metal-organic framework for highly efficient elimination of Cr(VI) in aqueous phase, *J. Mater. Chem. A*, 2019, 7, 16833–16841.
 6. Wen-Miao Chen, Xiao-Ling Meng, Gui-Lin Zhuang, Zhi Wang, Mohamedally Kurmoo, Quan-Qin Zhao, Xing-Po Wang, Bairong Shan, Chen-Ho Tung, Di Sun, A superior fluorescent sensor for Al^{3+} and UO_2^{2+} based on Co(II) metal–organic framework with exposed pyrimidyl Lewis base site, *J. Mater. Chem. A*, 2017, 5, 13079–13085.
 7. Xi-Yan Dong, Rui Wang, Jun-Zhe Wang, Shuang-Quan Zang and Thomas C. W. Mak, Highly selective sensing Fe^{3+} and proton conduction in a water-stable sulfonate-carboxylate Tb-organic-framework, *J. Mater. Chem. A*, 2015, 3, 641–647.
 8. Ruibiao Fu, Shengmin Hu and Xintao Wu, Rapid and sensitive detection of nitroaromatic explosives by new 3D lanthanide phosphonates, *J. Mater. Chem. A*, 2017, 5, 1952–1956.
 9. Zhaomin Hao, Xuezhi Song, Min Zhu, Xing Meng, Shuna Zhao, Shengqun Su, Weiting Yang, Shuyan Song and Hongjie Zhang, One-dimensional channel-structured Eu-MOF for sensing small organic molecules and Cu^{2+} ion, *J. Mater. Chem. A*, 2013, 1, 11043–11050.
 10. Lin Liu, Xiao-Nan Zhang, Zheng-Bo Han, Ming-Liang Gao, Xiao-Man Cao, and Shi-Ming Wang, An InIII-based Anionic Metal-Organic Framework: Sensitization of Lanthanide (III) Ions and Selective Absorption and Separation of Cationic Dyes, *J. Mater. Chem. A*, 2015, 3, 14157–14164.
 11. Sofia Rapti, Debajit Sarma, Stavros A. Diamantis, Euaggelia Skliri, Gerasimos S. Armatas, Athanassios C. Tsipis, Youssef S. Hassan, Mohamed Alkordi, Christos D. Malliakas, Mercouri G. Kanatzidis, Theodore Lazarides, John C. Plakatouras and Manolis J. Manos, All in one porous material: Exceptional sorption and selective sensing of hexavalent chromium by a Zr^{4+} MOF, *J. Mater. Chem. A*, 2017, 5, 14707–14719.
 12. Yan Yang, Feilong Jiang, Lian Chen, Jiandong Pang, Mingyan Wu, Xiuyan Wan, Jie Pan, Jinjie Qian and Maochun Hong, An unusual bifunctional Tb-MOF for highly sensing of Ba^{2+} ions and remarkable selectivities of CO_2/N_2 and CO_2/CH_4 , *J. Mater. Chem. A*, 2015, 3, 13526–13532.
 13. Ling Chen, Jia-Wen Ye, Hai-Ping Wang, Mei Pan, Shao-Yun Yin, Zhang-Wen Wei, Lu-Yin Zhang, Kai Wu, Ya-Nan Fan & Cheng-Yong Su, Ultrafast water sensing and thermal imaging by a metal-organic framework with switchable luminescence, *Nature Communications*, 2017, 8, 15985.
 14. Antioni Douvali, Athanassios C. Tsipis, Svetlana V. Eliseeva, Stéphane Petoud, Giannis S. Papaefstathiou, Christos D. Malliakas, Ioannis Papadas, Gerasimos S. Armatas, Irene Margiolaki, Mercouri G. Kanatzidis, Theodore Lazarides and Manolis J. Manos, Turn-On Luminescence Sensing and Real-Time Detection of Traces of Water in Organic Solvents by a Flexible Metal-Organic Framework, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2014, 53, 1–7.
 15. David Parker, Luminescent lanthanide sensors for pH, pO_2 and selected anions, *Coordination Chemistry Reviews*, 2000, 205, 109–130.

16. Michael T. Wharmby, John P. S. Mowat, Stephen P. Thompson and Paul A. Wright, Extending the Pore Size of Crystalline Metal Phosphonates toward the Mesoporous Regime by Isorecticular Synthesis, *J. Am. Chem. Soc.*, 2011, 133, 1266–1269.
17. Qi Liu, Yinyin Song, Yanhang Ma, Yi Zhou, Hengjiang Cong, Chao Wang, Jorryn Wu, Gaoli Hu, Michael O'Keeffe and Hexiang Deng, Mesoporous Cages in Chemically Robust MOFs Created by a Large Number of Vertices with Reduced Connectivity, *J. Am. Chem. Soc.*, 2019, 141, 1, 488–496.
18. Song-Song Bao, Li-Min Zheng, Magnetic materials based on 3d metal phosphonates, *Coordination Chemistry Reviews*, 2016, 319, 63–85.
19. Ana D.G. Firmino, Flávio Figueira, João P.C. Tomé Filipe A. Almeida Paz, João Rocha, Metal–Organic Frameworks assembled from tetraphosphonic ligands and lanthanides, *Coordination Chemistry Reviews*, 2018, 355, 15, 133–149.
20. Song-Song Bao, George K.H. Shimizu b, Li-Min Zheng, Proton conductive metal phosphonate frameworks, *Coordination Chemistry Reviews*, 2019, 378, 577–594.
21. Kevin J. Gagnon, Houston P. Perry, and Abraham Clearfield, Conventional and Unconventional Metal–Organic Frameworks Based on Phosphonate Ligands: MOFs and UMOFs, *Chem. Rev.*, 2012, 112, 2, 1034–1054.
22. Hua-Qing Yin, Xin-Yao Wang, Xue-Bo Yin, Rotation Restricted Emission and Antenna Effect in Single Metal–Organic Frameworks, *J. Am. Chem. Soc.*, 2019, <https://doi.org/10.1021/jacs.9b06755>.
23. Jared M. Taylor, Roger K. Mah, Igor L. Moudrakovski, Christopher I. Ratcliffe, Ramanathan Vaidhyanathan and George K. H. Shimizu, Facile Proton Conduction via Ordered Water Molecules in a Phosphonate Metal–Organic Framework, *J. Am. Chem. Soc.*, 2010, 132, 14055–14057.
24. Charity Nowlan, Yingchun Li, Johannes C. Hermann, Timothy Evans, Joseph Carpenter, Eman Ghanem, Brian K. Shoichet and Frank M. Raushel, Resolution of Chiral Phosphate, Phosphonate, and Phosphinate Esters by an Enantioselective Enzyme Library, *J. Am. Chem. Soc.*, 2006, 128, 15892–15902.
25. Simona Pili, Stephen P. Argent, Christopher G. Morris, Peter Rought, Victoria García-Sakai, Ian P. Silverwood, Timothy L. Easun, Ming Li, Mark R. Warren, Claire A. Murray, Chiu C. Tang, Sihai Yang and Martin Schröder, Proton Conduction in a Phosphonate-Based Metal–Organic Framework Mediated by Intrinsic “Free Diffusion inside a Sphere”, *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, 138, 20, 6352–6355.
26. Clearfield, A., Demadis, K., *Metal Phosphonate Chemistry*, Royal Society of Chemistry: Cambridge, UK, 2011; ISBN 978-1-84973-356-4.
27. Mao, J. G., Structures and luminescent properties of lanthanide phosphonates, *Coord. Chem. Rev.*, 2007, 1493–1520.
28. Deria, P., Bury, W., Hod, I., Kung, C. W., Karagiari, O., Hupp, J. T., Farha, O. K., MOF Functionalization via Solvent-Assisted Ligand Incorporation: Phosphonates vs Carboxylates, *Inorg. Chem.*, 2015, 54, 2185–2192.
29. Stock, N., Biswas, S., Synthesis of Metal–Organic Frameworks (MOFs): Routes to Various MOF Topologies, Morphologies, and Composites, *Chem. Rev.*, 2012, 112, 933–969.
30. Shekhah, O., Liu, J., Fischer, R. A., Wöll Ch., MOF thin films: existing and future applications, *Chem. Soc. Rev.*, 2011, 40, 1081–1106.

31. Stavila, V., Talin, A. A., Allendorf, M. D., MOF-based electronic and opto-electronic devices, *Chem. Soc. Rev.*, 2014, 43, 5994-6010.
32. Falcaro, P., Ricco, R., Doherty, C. M., Liang, K., Hill, A. J., Styles, M. J., MOF positioning technology and device fabrication, *Chem. Soc. Rev.*, 2014, 43, 5513-5560.
33. Wu, M. X., Yang, Y. W., Metal–Organic Framework (MOF)-Based Drug/Cargo Delivery and Cancer Therapy, *Adv. Mater.*, 2017, 29, 1606134.
34. Dhakshinamoorthy, A., Asiri, A. M., García H., Metal–Organic Framework (MOF) Compounds: Photocatalysts for Redox Reactions and Solar Fuel Production, *Angew Chem. Int. Ed.*, 2016, 55, 5414-5445.
35. Li, Y. S., Bux H., Feldhoff, A., Li, G. L., Yang W. S., Caro, J., Controllable Synthesis of Metal–Organic Frameworks: From MOF Nanorods to Oriented MOF Membranes, *Adv. Mater.*, 2010, 22, 3322-3326.
36. Liu, Y. L., Tang, Z. Y., Multifunctional Nanoparticle@MOF Core–Shell Nanostructures, *Adv. Mater.*, 2013, 25, 5819-5825.
37. Sheikh, J. A., Jena H. S., Clearfield, A., Konar, S., Phosphonate Based High Nuclearity Magnetic Cages, *Acc. Chem. Res.*, 2016, 49, 1093-1103.
38. Doherty, C. M., Buso, D., A. J., Furukawa, S., Kitagawa, S., Falcaro, P., Using Functional Nano- and Microparticles for the Preparation of Metal–Organic Framework Composites with Novel Properties, *Acc. Chem. Res.*, 2014, 47, 396-405.
39. Drake, T., Ji, P. F., Lin W. B., Site Isolation in Metal–Organic Frameworks Enables Novel Transition Metal Catalysis, *Acc. Chem. Res.*, 2018, 51, 2129-2138.
40. Ma X. J., Chai, Y. T., Li, P., Wang, B., Metal–Organic Framework Films and Their Potential Applications in Environmental Pollution Control, *Acc. Chem. Res.*, 2019, 52, 1461-1470.
41. Doonan, C., Riccò R., Liang, K., Bradshaw, D., Falcaro, P., Metal–Organic Frameworks at the Biointerface: Synthetic Strategies and Applications, *Acc. Chem. Res.*, 2017, 50, 1423-1432.
42. Lee, K. J., Lee, J. H., Jeoung, S., Moon, H. R., Transformation of Metal–Organic Frameworks/Coordination Polymers into Functional Nanostructured Materials: Experimental Approaches Based on Mechanistic Insights, *Acc. Chem. Res.*, 2017, 50, 2684-2692.
43. Begum, S., Hassan, Z., Bräse, S., Wölfl C., Tsotsala. M., Metal–Organic Framework-Templated Biomaterials: Recent Progress in Synthesis, Functionalization, and Applications, *Acc. Chem. Res.*, 2019, 52, 1598-1610.
44. Cui, Y. J., Li, B., He, H. J., Zhou, W., Chen, B. L., Qian, G. D., Metal–Organic Frameworks as Platforms for Functional Materials, *Acc. Chem. Res.*, 2016, 49, 483-493.
45. Xiao, J. D., Jiang, H. L., Metal–Organic Frameworks for Photocatalysis and Photothermal Catalysis, *Acc. Chem. Res.*, 2019, 52, 356-366.
46. Hosono, N., Kitagawa, S., Modular Design of Porous Soft Materials via Self-Organization of Metal–Organic Cages, *Acc. Chem. Res.*, 2018, 51, 2437-2446.
47. Zhu Y. P., Ren T. Z., Yuan, Z. Y., Insights into mesoporous metal phosphonate hybrid materials for catalysis, *Catal. Sci. Technol.*, 2015, 5, 4258-427.
48. Islamoglu, T., Goswami, S., Li, Z. Y., Howarth, A. J., Farha, O. K., Hupp, J. T., Postsynthetic Tuning of Metal–Organic Frameworks for Targeted Applications, *Acc. Chem. Res.*, 2017, 50, 805-813.
49. Shimizu, G. K. H., Vaidhyanathan, R., Taylor, J. M., Phosphonate and sulfonate metal organic frameworks, *Chem. Soc. Rev.*, 2009, 38, 1430-1449.

50. M. Carmo, D. L. Fritz, J. Mergel and D. Stolten, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2013, 38, 4901-4934.
51. X. Liu and F. Wang, *Coordination Chemistry Reviews*, 2012, 256, 1115-1136.
52. I. Roger, M. A. Shipman and M. D. Symes, *Nature Reviews Chemistry*, 2017, 1, 0003
53. G. C. Dismukes, R. Brimblecombe, G. A. Felton, R. S. Pryadun, J. E. Sheats, L. Spiccia and C. R. Swiegers, *Accounts of Chemical Research*, 2009, 42, 1935-1943.
54. L. Duan, F. Bozoglian, S. Mandal, B. Stewart, T. Privalov, A. Llobet and L. Sun, *Nat Chem*, 2012, 4, 418-423.
55. S. Iwata and J. Barber, *Current Opinion in Structural Biology*, 2004, 14, 447-453.
56. M. W. Kanan and D. G. Nocera, *Science*, 2008, 321, 1072-1075.
57. M. D. Karkas, O. Verho, E. V. Johnston and B. Akermark, *Chem Rev*, 2014, 114, 11863-12001.
58. M. Liu, W. You, Z. Lei, G. Zhou, J. Yang, G. Wu, G. Ma, G. Luan, T. Takata, M. Hara, K. Domen and C. Li, *Chem Commun (Camb)*, 2004, 2192-2193.
59. D. Wang, R. N. Sampaio, L. Troian-Gautier, S. L. Marquard, B. H. Farnum, B. D. Sherman, M. V. Sheridan, C. J. Dares, G. J. Meyer and T. J. Meyer, *J Am Chem Soc*, 2019, 141, 7926-7933.
60. Y. Xie, D. W. Shaffer and J. J. Concepcion, *Inorg Chem*, 2018, 57, 10533-10542.
61. J. Yano, J. Kern, K. Sauer, M. J. Latimer, Y. Pushkar, J. Biesiadka, B. Loll, W. Saenger, J. Messinger, A. Zouni and V. K. Yachandra, *Science*, 2006, 314, 821-825.
62. J. Yang, Y. Xiao, Q. Zhao, G. Zhang, R. Wang, G. Teng, X. Chen, M. Weng, D. He, S. Mu, Y. Lin and F. Pan, *Nano Energy*, 2019, 59, 443-452.
63. C. C. McCrory, S. Jung, I. M. Ferrer, S. M. Chatman, J. C. Peters and T. F. Jaramillo, *J Am Chem Soc*, 2015, 137, 4347-4357.
64. C. C. McCrory, S. Jung, J. C. Peters and T. F. Jaramillo, *J Am Chem Soc*, 2013, 135, 16977-16987.
65. E. Tsuji, A. Imanishi, K.-i. Fukui and Y. Nakato, *Electrochimica Acta*, 2011, 56, 2009-2016.
66. J. D. Blakemore, N. D. Schley, G. W. Olack, C. D. Incarvito, G. W. Brudvig and R. H. Crabtree, *Chem. Sci.*, 2011, 2, 94-98.
67. T. Shinagawa, M. T. K. Ng and K. J. A. C. Takanabe, *Angew. Chem*, 2017, 129, 5143-5147.
68. X. F. Lu, L. F. Gu, J. W. Wang, J. X. Wu, P. Q. Liao and G. R. J. A. M. Li, *Adv. Mater*, 2017, 29, 1604437.
69. T. Y. Ma, S. Dai, M. Jaroniec and S. Z. J. J. o. t. A. C. S. Qiao, *J. Am. Chem. Soc.*, 2014, 136, 13925-13931.
70. H. Liang, F. Meng, M. Caban-Acevedo, L. Li, A. Forticaux, L. Xiu, Z. Wang and S. Jin, *Nano Lett*, 2015, 15, 1421-1427.
71. W. Liu, H. Liu, L. Dang, H. Zhang, X. Wu, B. Yang, Z. Li, X. Zhang, L. Lei and S. Jin, *Adv. Funct. Mater*, 2017, 27, 1603904.
72. Y. Yang, L. Dang, M. J. Shearer, H. Sheng, W. Li, J. Chen, P. Xiao, Y. Zhang, R. J. Hamers and S. Jin, *Adv. Energy Mater*, 2018, 8, 1703189.
73. G.-F. Chen, T. Y. Ma, Z.-Q. Liu, N. Li, Y.-Z. Su, K. Davey and S.-Z. Qiao, *Adv. Funct. Mater*, 2016, 26, 3314-3323.
74. B. Q. Li, S. Y. Zhang, C. Tang, X. Cui and Q. Zhang, *Small*, 2017, 13, 1700610.
75. M. Caban-Acevedo, M. L. Stone, J. R. Schmidt, J. G. Thomas, Q. Ding, H. C. Chang, M. L. Tsai, J. H. He and S. Jin, *Nat Mater*, 2015, 14, 1245-1251.
76. X. Xiao, C.-T. He, S. Zhao, J. Li, W. Lin, Z. Yuan, Q. Zhang, S. Wang, L. Dai and D. Yu, *Energy*

- & Environmental Science, 2017, 10, 893-899.
77. F. Meng, H. Zhong, D. Bao, J. Yan and X. Zhang, *J Am Chem Soc*, 2016, 138, 10226-10231.
 78. J. M. V. Nsanzimana, Y. Peng, Y. Y. Xu, L. Thia, C. Wang, B. Y. Xia and X. Wang, *Adv. Energy Mater.* 2017, 1701475.
 79. A. Li, H. Ooka, N. Bonnet, T. Hayashi, Y. Sun, Q. Jiang, C. Li, H. Han and R. Nakamura, *Angew Chem Int Ed Engl*, 2019, 58, 5054-5058.
 80. J. R. McKone, B. F. Sadtler, C. A. Werlang, N. S. Lewis and H. B. Gray, *ACS Catal*, 2013, 3, 166-169.
 81. J. Tian, N. Cheng, Q. Liu, X. Sun, Y. He and A. M. Asiri, *Journal of Materials Chemistry A*, 2015, 3, 20056-20059.
 82. Y. Wang, G. Zhang, W. Xu, P. Wan, Z. Lu, Y. Li and X. Sun, *ChemElectroChem*, 2014, 1, 1089-1089.
 83. M. Gong, Y. Li, H. Wang, Y. Liang, J. Z. Wu, J. Zhou, J. Wang, T. Regier, F. Wei and H. Dai, *J Am Chem Soc*, 2013, 135, 8452-8455.
 84. X. Li, F. C. Walsh and D. Pletcher, *Phys Chem Chem Phys*, 2011, 13, 1162-1167.
 85. X. Lu and C. Zhao, *Nat Commun*, 2015, 6, 6616.
 86. D. Zhang, L. Meng, J. Shi, N. Wang, S. Liu and C. Li, *Electrochimica Acta*, 2015, 169, 402-408.
 87. M. W. Louie and A. T. Bell, *J Am Chem Soc*, 2013, 135, 12329-12337.
 88. T. N. Lambert, J. A. Vigil, S. E. White, D. J. Davis, S. J. Limmer, P. D. Burton, E. N. Coker, T. E. Beechem and M. T. Brumbach, *Chem Commun (Camb)*, 2015, 51, 9511-9514.
 89. Y. Li, F.-M. Li, X.-Y. Meng, X.-R. Wu, S.-N. Li and Y. Chen, *Nano Energy*, 2018, 54, 238-250.
 90. Z. Tan, L. Sharma, R. Kakkar, T. Meng, Y. Jiang and M. Cao, *Inorg. Chem*, 2019, 58, 7615-7627.
 91. Pietraskiewicz, M., *Synthetic Methods in Supramolecular Chemistry*, *J. Coord. Chem.*, 1992.
 92. Balzani, V., Scandola, F., *Supramolecular Photochemistry*, New York: Ellis Horwood, 1991.
 93. Martell, A., E., ed. *Coordination Chemistry*. New York: Von Nostrand Reinhold Co, 1971.
 94. Bailar, J., C., Jr., *Chemistry of the Coordination Compounds*. New York: Reinhold Publishing Corp, 1956.
 95. Laidler, K., J., *Frontiers of Chemistry*. Pergamon Press, 1981.
 96. Chen Chin-Ti, Suslick, K., S., *Coord. Chem. Rev.*, 1993.
 97. Werner A. *New Ideas on Inorganic Chemistry*. Translated by Hedley E P. London: Longmans, Green and Co, 1911.
 98. Alivisatos, A., P., Barbara, P., F., Castleman, A., W., et al. *Adv Mater*, 1998.
 99. Pecorato, V., I., Stemmler, A., J., Karlin, K., D., *Progress in Inorganic Chemistry*. 1997.
 100. Lindoy, L., F., *The Chemistry of Macrocyclic Ligand Complexes*. Cambridge University Press, 1989.
 101. Pometants, M., Dracol, F., H., Segmuller, A. *Phy. Rev. Lett.*, 1978.
 102. Stynes, H., C., and Ibers, J., A., *Inorg. Chem.*, 1971, 10, 2304.
 103. Gaswick, D., and Haim, A., J., *Am. Chem. Soc.*, 1974, 96, 7845.
 104. Basolo, F., Gray, H., B., and Pearson, R., G., *J. Am. Chem. Soc.*, 1960, 82, 4200.
 105. Cannon, R., D., Gardiner, J., *Inorg. Chem.*, 1974, 13, 390.
 106. Steven, A., Sunshine, D., A. *Acc. Chem. Res.*, 1987; 20(11); 395-400.
 107. William, C., B., *Chem. Rev.*, 1932; 10(1); 161-177.

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
A	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···A 分子识别功能的有机多孔框架材料的设计与组装。
B	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。
C	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

全日制博士研究生攻读博士学位，学习年限脱产学习学制为 3 年；在职攻读学制为 4 年。因特殊原因需延长学习年限者需由本人提出书面报告，所在学院审查同意，上报研究生院审批，学习年限最长不超过 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 2020 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。未尽事宜由学院学位评定分委会负责解释。

《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：A. 有机超分子化学、B. 金属有机-多酸化学。

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	
			应用有机化学理论方法专题研讨	3	48	1	
		专业 方向 课	A C 有机超分子化学前沿理论专题研讨	2	32	2	
			B 金属有机-多酸化学前沿理论专题研讨	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、王当愍、潘承璜:《X射线光电子能谱分析》,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
A	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。
B	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。
C	功能分子材料设计	分子基功能材料的合成组装、功能调控开发和相关应用研究

三、学制与学习年限

全日制博士研究生攻读博士学位，学习年限脱产学习学制为 3 年；在职攻读学制为 4 年。因特殊原因需延长学习年限者需由本人提出书面报告，所在学院审查同意，上报研究生院审批，学习年限最长不超过 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 2020 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。未尽事宜由学院学位评定分委会负责解释。

《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：A. 理论与计算化学、 B. 催化化学、C. 功能分子材料设计。

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	
			物理化学理论方法专题研讨		3	48	1	
		专 业 方 向 课	A C	理论化学前沿领域专题研讨	2	32	2	
			B	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. 魏谏、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. Cárdenas, 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., Desiiraju, 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 Susses, 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 H_3O^+ (H_2O)_n ($n= 1-5$) and $\text{OH}-(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n= 1-4$), *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. Int. 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. Rappé 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. Rezák, 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. In. Ed.*, 2006, *45*, 4064-4092.
 64. Vegiri, A., Shevkunov, S. V., Hydration shell structure of the $\text{OH}^- (\text{H}_2\text{O})_n$ $n=1-15$ 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 ABEEM $\sigma\pi$ 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 Force 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 $(NH_3)_n$ ($n=1-5$) 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 $CH_2CH_2+F \rightarrow CH_2CHF+H$, *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.