





## 一、实验室年度工作概述

(年度研究工作、年度管理工作, 限 500 字)

2014 年, 围绕实验室的建设目标, 在科研方面取得了如下进展: (1) 发展了“量子路径平均场”方法, 完善了“非绝热分子动力学”模拟方案; 发展了广义非绝热动力学方法和程序包; (2) 首次使用 QM/MM 方法结合 MD 模拟研究了细菌发光的整个过程, 搞清了细菌发光的微观机理及影响发光波长的因素; 深入研究了多种发光材料的发光机理; 为研究仿生和白光发光二极管提供有力的理论基础; (3) 发展多尺度的模拟方法, 研究各类功能分子如抗菌肽、人体胰岛淀粉样多肽、霍乱病毒毒素所诱导生物膜构型变化以及信号调控作用; 研究了铂药化合物对蛋白运输的影响、以及 APT 调控的蛋白变构机理; (4) 在光电功能材料方面, 设计、合成、表征含葱具有宽带性质的超支化共轭聚, 进行了高能量转换效率聚合物太阳能电池给体材料和受体材料的设计与合成, 完成聚合物太阳能电池器件的制备与性能测试。

在队伍建设方面, 2014 年邵久书教授牵头获得国家自然科学基金委创新研究群体; 刘亚军教授获得国家自然科学基金委杰出青年基金资助; 薄志山教授被评为长江学者; 引进青年千人崔刚龙教授。

在管理方面, 落实了严格的实验室管理条例。

## 二、实验室工作纪要

### 1. 科研项目

新立科研项目 8 项, 批准经费 854 万元, 在研项目 65 项, 到位经费 6400 万元, 固定人员 40 人, 人均科研经费



40 万元/年 (不含校内立项)。

校内立项\_\_\_\_项, 经费\_\_\_\_万元。

实验室新立科研项目清单

序号	课题名称	课题批准号	负责人	起止时间	经费 (万元)	类别
1	生物发光的理论研究	21325312	刘亚军	2014.1-2017.12	320	国家基金委杰出青年基金
2	功能化大环多胺有机分子作为非病毒基因载体的设计合成及与性能研究	21372032	卢忠林	2014.1-2017.12	80	国家自然科学基金面上项目
3	羟基烷氧自由基的反应动力学研究	21373033	祖莉莉	2014.1-2017.12	84	国家自然科学基金面上项目
4	氮杂环卡宾-酸/碱协同或串联催化反应研究	21372030	成莹	2014.1-2017.12	85	国家自然科学基金面上项目
5	X-H键活化和偶联催化反应机理的理论研究	21373030	方德彩	2014.1-2017.12	80	国家自然科学基金面上项目
6	有机发光二极管、电致发光机理的理论研究	21373029	陈雪波	2014.1-2017.12	80	国家自然科学基金面上项目
7	多层次自组装的多尺度模拟	21373031	高靓辉	2014.1-2017.12	80	国家自然科学基金面上项目
8	基于电路 QED 系统的单量子态操控研究	91321106	李新奇	2014.1-2015.12	45	基金委

注: 请依次以“973”计划(973)、“863”计划(863)、国家自然科学基金(面上、重点和



重大、创新研究群体计划、杰出青年基金、重大科研计划)、国家科技(攻关)、国防重大、国际合作、省部重大科技计划、重大横向合作等为序填写,并在类别栏中注明。课题负责人不是本室固定(正式聘任)人员的课题不填报。

## 2、主要研究成果

本年度发表论文 46 篇(其中三大检索(SCI、EI 及 CPCI-S 等) 46 篇,核心期刊 46 篇),专著      部,授权专利      项(其中发明专利      项、实用新型      项、外观设计      项)

代表性研究成果清单

序号	类型	名称	完成人	刊物、出版社 或授权单位名称	年、卷、期、 页 或专利号	他引次数 或出版数 量
1	论文	Concerted Asynchronous Hula-Twist Photoisomerization in the S65T/H148D Mutant of Green Fluorescent Protein	陈雪波 崔刚龙	ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION	2014,53 8649-8653	0
2	论文	Vibrational Spectra of Chemical and Isotopic Variants of Oxyluciferin, the Light Emitter in the Firefly Bioluminescence	刘亚军	Chem. Eur. J	2014,20, 10782 – 10790	0
3	论文	Understanding bacterial bioluminescence: A theoretical study of the entire process, from reduced flavin to light emission	刘亚军	Chem. Eur. J.	2014,20, 7979-7986	0
4	论文	Quantum Markovian master equation for scattering from surfaces	邵久书	J. Chem. Phys.	2014, 140, 014104	0
5	论文	Nonadiabatic molecular dynamics simulation: An approach based on quantum measurement picture	李新奇	AIP Advances	2014,4(7) 077131	0
6	论文	Molecular Dynamics Simulation of the Allosteric Regulation of eIF4A Protein from the Open to Closed State, Induced by ATP and RNA Substrates	王艳	PLOS ONE	2014, 9, e86104	0



7	论文	Generalized trajectory surface-hopping method for internal conversion and intersystem crossing	崔刚龙	J. Chem. Phys.	2014,141	0
8	论文	ON-OFF mechanism of a fluorescent sensor for the detection of Zn(II), Cd(II), and Cu(II) transition metal ions	陈雪波	Analytical Chemistry	2014,86(1) 891-899	0
9	论文	Excited-state proton coupled electron transfer between photolyase and the damaged DNA through water wire: A photo-repair mechanism	陈雪波	Physical Chemistry Chemical Physics	2014,16(46) 25432-25441	0
10	论文	Color- and Morphology-Controlled Self-Assembly of New Electron-Donor-Substituted Aggregation-Induced Emission Compounds	那娜 欧阳津	Langmuir	2014, 30 2351-2359	0

注：请依次以论文（国外）、论文（国内）、专著或其中章节（外文）、专著（中文）、专利（外国）、专利（中国）为序分别填报。非第一完成单位的成果不填。研究生、博士后等非本室固定人员完成人用斜体字表示。所有成果必须是署名为实验室的成果。

### 3、科技奖励

获国家级/省部级科技奖励\_\_\_\_项，申报科技奖励\_\_\_\_项。

申报科技奖励情况

序号	奖励类型	成果名称	第几完成人/第几完成单位	备注（获奖/申报）
1				
2				
3				
.....				

注：请填写实验室 2014 年申报和获得科技奖励情况。



#### 4、队伍建设

固定人员 40 人,其中院士 1 人、长江学者 2 人、杰青 8 人、新世纪人才 3 人

序号	姓名	技术职称	在实验室 工作时间	团队 协作
1	方维海	教授	10	是
2	成莹	教授	10	是
3	邵久书	教授	10	是
4	范楼珍	教授	10	是
5	方德彩	教授	10	是
6	王艳	教授	10	是
7	陈光巨	教授	10	是
8	李新奇	教授	10	是
9	夏珂	教授	10	是
10	薄志山	教授	10	是
11	汪辉亮	教授	10	是
12	崔刚龙	教授	10	是
13	欧阳津	教授	10	是
14	贾宗超	教授	10	是
15	江华	教授	10	是
16	郑积敏	教授	10	是
17	祖莉莉	教授	10	是



19	杨国建	教授	10	是
20	黄元河	教授	10	是
21	胡劲波	教授	10	是
22	卢忠林	教授	10	是
23	侯国华	副教授	10	是
24	刘亚军	教授	10	是
25	自国甫	教授	10	是
26	高靓辉	副教授	10	是
27	李晓红	教授	10	是
28	陈雪波	教授	10	是
29	丁万见	副教授	10	是
30	谭宏伟	副教授	10	是
31	朱 嘉	副教授	10	是
32	那 娜	副教授	10	是
33	李敏峰	副教授	10	是
34	焦 鹏	副教授	10	是
35	秦卫东	教授	10	是
36	刘红云	副教授	10	是
37	方 道	副教授	10	是
38	陶海荣	讲师	10	是
39	张媛	实验师	10	是
40	韩娟	实验师	10	是



注：(1)请填写具有高级职称的固定研究人员和技术人员。(2)在“团队协作栏”中填写“是”：实质性参加了至少一项代表性成果的研究工作（以署名为准）；“否”：没有参加代表性成果的研究工作。

## 5、人才引进和研究生培养

培养博士 18 人，硕士 35 人，其他      人；

引进人才 1 人，其中院士      人、长江学者      人、杰青      人、新世纪人才      人，青年千人 1 人

## 6、学术委员会会议纪要

2014年11月15日学术委员会全体委员在北京师范大学化学学院举行学术委员会会议，会议认真总结了2014年的科研和管理管理工作，对实验室以在为依托、培养高水平人才方面所做的工作给予了充分肯定，同时会议也对实验室今后的发展和建设提出了具体的意见和建议，提出实验室的宗旨是推进理论和方法的发展；以理论为主导发展实验方法和手段；与生物体系结合，开展原创性研究工作。此会议进一步明确了今后的工作任务和重点，即提升科学目标、提升人员容量。

## 7、国内外学术交流和会议

### (1) 流动人员情况

序号	姓名	性别	年龄	从事专业	技术职称	工作单位	在实验室工作期限
1	王浩斌	男	46	物理化学	教授	美国新墨西哥州立大学	长期
2	吉琳	女	37	物理化学	副教授	首都师范大学	2014.9-2015.7
3	王涛	男	32	药物化学	讲师	长治医学院药理学系	一年
4	格日勒	女	43	应用化学	高级工程师	银川能源学院	一年
5	彭聪虎	男	43	有机化学	副教授	安阳工学院化学与环境工程学院	一年

注：在“实验室工作期限”栏中填写每人实际在实验室工作的起止时间

### (2) 承办大型学术会议情况



序号	会议名称	主办单位名称	会议主席	召开时间	参加人数	类别
1	Workshop of Introduction to Gaussian: Theory and Practice	北京师范大学理论及计算光化学教育部重点实验室与 Gaussian 公司	方维海	2014 年 8 月 18 日-8 月 22 日	160 人	研究生暑期学校
2						
3						
.....						

注：请按全球性、地区性、双边性、全国性等类别排序，并在类别栏中注明。

### (3) 国内外学术交流与合作情况

(请列出国内外学术交流与合作的主要活动，特别是参与国际重大科研计划的情况。限 200 字)

1. 刘亚军教授应邀参加 2014 年度国际生物发光和化学发光大会并做口头报告，地点：瑞典 UPPSALA 大学，时间：Jun. 23-28;
2. 刘亚军、陈雪波、高靓辉应邀参加第十二届全国量子化学会议并做邀请报告，地点：太原，时间：Jun. 12-15。
3. 中国化学会第 29 届学术年会 (2014.8.4-7 北京)，参加人员：欧阳津；那娜 (分会报告)
4. 中国化学会首届全国质谱分析学术研讨会 (2014.4.25-28 北京)，参加人员：欧阳津；那娜 (邀请报告)
5. 2014 年分析化优秀中青年学者研讨会 (2014.11.21-23 广州)，参加人员：那娜 (邀请报告)

### (4) 开放课题设立情况

(请列出开放课题清单，并对现有开放课题的进展情况进行简要介绍，限



200 字)

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

## 8、运行经费、主任基金等的筹措及使用情况

(限 200 字)

本实验的工作以计算模拟为主,同时开展一些光谱实验研究。除了学校的拨付的运行经费(50 万),实验室筹措到主任基金 50 万元。这些经费主要用于购置计算机、光谱学仪器部件和实验室的日常运行管理。

## 9、其他典型性成果介绍

依托高校意见:

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

依托单位负责人签字:

(单位公章)

年 月 日

