

24	计算物理	344
25	量子光学	347
0703	化学一级学科研究生核心课程指南	350
01	分子光谱学	350
02	高等仪器分析	352
03	高等无机化学	354
04	高等有机化学	357
05	高等有机合成	359
06	高等分离分析	364
07	高等高分子化学	365
08	高分子凝聚态物理	368
09	化学生物学	371
10	化学动力学	373
11	先进材料化学	377
12	高等结构化学	380
13	量子化学	382
0704	天文学一级学科研究生核心课程指南	385
01	天文观测与数据处理	385
02	天体测量学	386
03	广义相对论	389
04	现代天体力学	391
05	天体物理辐射过程	394
06	恒星结构与演化	396
07	星系宇宙学	398
0705	地理学一级学科研究生核心课程指南	401
01	高等自然地理学	401
02	人文地理学研究方法	403
03	遥感科学与技术	409
04	高等地图学	411
05	地理信息科学	414
06	全球变化科学	419
07	国土空间规划理论与实践	422
08	高等经济地理学	425
09	地理计算方法	428
10	GIS 程序与设计	432
11	地理学野外工作方法	436
0706	大气科学一级学科研究生核心课程指南	438
01	理论和计算地球流体力学	438
02	高等大气物理学	441
03	物理气候学	444
04	高等天气学	447

0703 化学一级学科研究生核心课程指南

01 分子光谱学

一、课程概述

分子光谱学是研究分子与光之间的相互作用与能量交换过程,即分子吸收光能,或分子内部能量转化为光辐射。通过分子光谱研究,可获得分子的几何结构、电子-振动-转动能级结构,以及分子间反应与能量转移等丰富的信息。至今为止,分子光谱研究成果已经广泛应用于化学(如分子反应)、生物(如细胞结构、生化反应)、材料科学、环境科学(如大气、水质检测)、能源科学(如燃烧化学)以及医疗诊断等领域。

分子光谱学可为化学学科中物理化学、化学物理、光化学、分析化学等专业的研究生提供分子光谱基本原理和分析方法等方面的基础知识,通过本课程的学习,可弄清分子光谱本质与特征、跃迁选择定则、分子电子-振动-转动能级、频率等要素,把握双原子分子和多原子分子的微波谱、红外光谱、紫外可见吸收光谱和发射光谱等的基本解析方法。分子光谱学在化学学科研究生课程体系中具有重要的作用,可为相关专业博士和硕士研究生开展相关光谱研究工作打下坚实的理论基础。

二、先修课程

量子力学(或量子化学)、结构化学。

三、课程目标

通过本课程的学习,掌握分子光谱的理论基础,认识分子的电子运动、振动和转动的能级结构和跃迁规律,掌握分子微波谱、红外光谱、紫外可见吸收光谱和发射光谱等方面的基本解析方法,了解分子光谱研究常用仪器、测量技术和应用,为相关专业研究生开展相关光谱研究工作打下坚实的理论基础。

四、适用对象

化学学科中物理化学、化学物理、光化学、分析化学等专业的博士和硕士研究生。

五、授课方式

结合国内外分子光谱最新研究动态与研究成果,将课堂教学与分子光谱研究应用结合起来进行教学,强调课堂启发式、互动式、参与式教学,在教学方法上结合 PPT 与多媒体课件、视频材

料等手段,突出本课程基础与应用交叉的特点。

六、课程内容

本课程由分层递进、相辅相成的三个部分组成。其中第一部分包括第一~四章,旨在为学习者提供双原子分子光谱基本原理和方法,系统介绍双原子分子光谱中基本概念、原理和分析方法,包括:跃迁几率、光吸收、光发射、谱线的线形和线宽等基本概念;双原子分子中电子运动、振动和转动的量子力学处理方法;双原子分子能级结构和跃迁规律;双原子分子微波谱、红外光谱、紫外可见吸收光谱和发射光谱的基本解析方法。第二部分包括第五~八章,描述多原子分子光谱基本原理,重点介绍多原子分子光谱中基本概念和分析方法,包括:多原子分子中电子运动、振动和转动的量子力学处理方法;多原子分子能级结构和跃迁规律;多原子分子微波谱、红外光谱、紫外可见吸收光谱和发射光谱等方面的基本解析方法。第三部分包括第九~十二章,在双原子和多原子分子光谱学习的基础上,介绍现代分子光谱学进展,以及激光光谱学中常用仪器、测量技术和应用。本课程重点内容包括两个方面:双原子分子微波谱、红外光谱、紫外可见吸收光谱和发射光谱基本解析方法;多原子分子微波谱、红外光谱、紫外可见吸收光谱和发射光谱基本解析方法。

第一章 绪论

主要内容:分子光谱学中物理量,分子光谱基本测量方法。

第二章 光吸收与光发射

主要包括:光吸收与光发射的跃迁概率,爱因斯坦辐射理论,谱线线型与线宽。

第三章 双原子分子的转动光谱和振动光谱

主要内容:Born-Oppenheimer 近似,刚性转子模型,谐振子模型,振动-转子模型,双原子分子转动光谱,双原子分子振转光谱。

第四章 双原子分子的电子光谱

主要内容:双原子分子电子态,双原子分子核运动与电子运动的耦合,双原子分子波函数宇称,同核双原子分子核自旋与泡利原理,双原子分子电子态跃迁选择定则,双原子分子电子态跃迁中转动结构,双原子分子电子态跃迁中振动结构。

第五章 多原子分子的转动光谱

主要内容:群论基础,刚性转子惯量主轴,多原子分子转动能级,多原子分子转动光谱。

第六章 多原子分子简正振动与对称性

主要内容:多原子分子简正振动,多原子分子对称性,内部对称坐标。

第七章 多原子分子振动光谱

主要内容:振动本征函数与振动能级,振动波函数对称性,振转跃迁选择定则,线性多原子分子红外光谱,非线性多原子分子红外光谱。

第八章 多原子分子电子光谱

主要内容:多原子分子电子态,分子电子运动与振动的耦合,电子态跃迁选择定则,线性多原子分子电子光谱,非线性多原子分子红外光谱。

第九章 激光光谱技术发展简史

第十章 光谱仪的基本原理与结构

主要内容:不同类型光谱仪的基本原理和应用范围,摄谱仪和单色仪,干涉仪,光谱信号检测技术,激光光源。

第十一章 常用激光光谱技术的实验原理与分析方法

主要内容:激光吸收光谱技术,激光诱导荧光光谱,非线性光谱,激光拉曼光谱,光学泵浦和双共振技术,相干光谱学。

第十二章 分子光谱技术的应用

主要内容:精密量子测量的应用,大气与环境科学的应用,天文观测的应用,其他领域中重要应用。

■重点:分子光谱本质与特征、跃迁选择定则、分子电子-振动-转动能级、频率和分子光谱分析方法;双原子分子微波谱、红外光谱、紫外可见吸收光谱和发射光谱基本解析方法;多原子分子微波谱、红外光谱、紫外可见吸收光谱和发射光谱基本解析方法。

■难点:微波谱、红外光谱、紫外可见吸收光谱和发射光谱的分析方法。

七、考核要求

期末开卷(或者闭卷)考核(70%)、其他(包括平时成绩、作业和小论文等)(30%)。

八、编写成员名单

李全新(中国科学技术大学)、刘世林(中国科学技术大学)、杨金龙(中国科学技术大学)

02 高等仪器分析

一、课程概述

本课程是分析化学专业研究生的专业核心课,同时也可作为化学其他学科及生物、材料、资源环境和地球科学等相关专业的研究生的选修课。高等仪器分析的目的是建立有效而实用的原位、实时、在线和高选择的现代分析化学方法。

二、先修课程

分析化学、无机化学、有机化学、物理化学。

三、课程目标

通过本课程的学习,使学生能进一步掌握常用仪器分析的原理、特点、应用和发展,具有应用此类方法解决相应问题的能力,为进一步深入学习现代化学和从事相关专业研究打下基础。

四、适用对象

本课程主要为分析化学专业研究生的专业核心课,同时也可作为化学其他学科及生物、材料、资源环境和地球科学等相关专业的研究生的选修课。

五、授课方式

在教学方法上结合多媒体课件、视频材料等手段,同时注重课堂上讨论和互动。

六、课程内容

第一章 绪论(2学时)

化学分析与仪器分析的关系,分析化学的发展方向,分析化学中的仪器分析方法,仪器分析的基本原理;样品分析步骤:方法选择、采样、样品预处理、分析测试、数据处理、分析报告;介绍采样的原则、样品预处理方法、分析数据的质量控制和保证。

第二章 原子光谱(2学时)

原子光谱法基础;原子吸收光谱的基本原理,原子吸收光谱仪,原子吸收分析中的干扰效应及抑制方法,原子吸收分析的实验技术;原子荧光光谱法、原子发射光谱法的基本原理。

第三章 分子光谱(6学时)

紫外-可见分子吸收光谱,光吸收定律,紫外及可见分光光度计,化合物电子光谱的产生,紫外-可见分子吸收光谱法的应用;荧光和磷光的产生,荧光、磷光与有机化合物结构的关系,影响光致发光的因素,荧光和磷光的分析仪器,荧光、磷光分析及应用,化学发光原理及应用;红外吸收光谱基本原理,基团频率和特征吸收峰,红外光谱仪,试样的制备,红外吸收光谱法的应用;激光拉曼光谱法基本原理,拉曼光谱的仪器装置,拉曼光谱法的应用,表面增强拉曼技术,其他类型的拉曼光谱法。

第四章 电化学分析法(6学时)

扩散电流理论,数字模拟技术,电分析仪器原理,控制电位分析,控制电流分析,交流与脉冲技术,阻抗分析,旋转电极,超微电极,液/液界面,电化学联用技术、电分析方法应用简介。

第五章 核磁共振波谱(6学时)

基本原理,核磁共振波谱仪和试样的制备,化学位移和核磁共振谱,简单自旋偶合和自旋分裂,复杂图谱的简化方法,核磁共振谱的应用,其他核磁共振谱。

第六章 质谱(6学时)

质谱基本原理,样品制备以及谱图解析;有机化合物的碎裂机理,多级质谱;无机质谱和分子质谱的应用;生命分析中涉及的质谱应用。

第七章 表面分析方法(6学时)

X射线光谱法基本原理,仪器基本结构,X射线荧光法、X射线吸收法、X射线衍射法;电子能谱法,电子显微镜和电子探针,扫描隧道显微镜和原子力显微镜。

第八章 其他分析方法(6学时)

热分析,微全分析系统,化学及生物传感器,免疫分析、成像分析等。

■ 重点:光谱分析、核磁共振波谱和质谱。

- 难点:电化学分析、有机化合物核磁共振波谱和质谱数据解析。

七、考核要求

期末开卷(或者闭卷)考核(70%)、其他(包括平时成绩、作业和小论文等)(30%)。

八、编写成员名单

汪福意(中国科学院)、白春礼(中国科学院)

03 高等无机化学

一、课程概述

高等无机化学课程以配体场理论、分子轨道理论为基础,主要涉及固体化学、配位化学、团簇化学,以及生物无机化学等无机化学分支内容,更侧重从整体上把握无机化学学科内容。本课程主要内容涵盖物质对称性、配合物中的化学键、固体的光谱和磁性、无机反应机理、有机金属化学及其催化、原子团簇化学、固体能带理论、生物无机化学和超分子以及计算无机化学等内容,并结合大量实例讲解无机化学各方向的基础知识,以及应用拓展等。对于近几年的相关进展也涵盖在本课程内容中。

高等无机化学是总览无机化学四大方向固体化学、配位化学、团簇与纳米化学以及生物无机化学的重要课程,是在本科阶段对无机化学学科相关课程学习的基础上,进行总体集成与提高的课程,是研究生从学习生涯到科研生涯过渡的重要基础课程。

二、先修课程

化学原理、无机化学、物理化学、结构化学或高等物理化学等。

三、课程目标

高等无机化学是无机化学或者其他化学专业必修基础课程,目标是对学生从学习基础知识到科研本领在知识点、思维方式上进行培养。本课程与大学化学诸多课程相衔接,在研究生阶段具有重要的承上启下作用,旨在培养无机化学研究生整体知识结构及能力结构。高等无机化学以学习和掌握无机化学基础理论与前沿科研内容为主线,运用无机化学基本原理知识,阐述无机化学与社会、科学、生产的联系,提高无机化学科研素养为总目标。通过本课程的教学,使学生掌握物质对称性、配合物中的化学键、固体的光谱和磁性、无机反应机理、有机金属化学及其催化、原子团簇化学、固体能带理论、生物无机化学和超分子以及计算无机化学等基本内容,培养具有分析和解决无机化学科研问题的能力,为参与科研工作提供必要的理论思维基础。

四、适用对象

面向所有博士和硕士研究生。研究生组成以研究生一年级为主,也适用于考入的博士一年级学生。适用于化学、材料、物理、地学、工程等相关专业研究生,以及化学、物理高年级本科生。

五、授课方式

授课方式包括课堂讲授、学生自学、自由讨论、翻转课堂、选题探索等。通过上述环节,使学生掌握无机化学基础理论与基本原理,培养学生具有分析和解决无机化学前沿科研问题,以及自学无机化学的能力。授课形式以 PPT 为主、板书为辅。

六、课程内容

第一章 配位化合物

第一节 晶体场-配体场理论

第二节 影响晶体场分裂能的因素

第三节 过渡金属配合物

第四节 分子轨道理论

- 重点:钙钛矿中的晶体场理论认识,过渡金属配合物的电子光谱。
- 难点:配位化合物的几何构型,d 轨道能级分裂对配合物性质的影响。

第二章 无机反应机理

第一节 基本概念

第二节 八面体配合物的取代反应

第三节 平面正方形配合物的取代反应

第四节 电子转移反应

- 重点:溶液中无机物配位解离过程对产物的影响及规律。
- 难点:反应过程和反应速率的关系,反应产物形成规律。

第三章 有机过渡金属化合物

第一节 有机金属化学基础知识

第二节 过渡金属羰基化合物

第三节 类似羰基的有机过渡金属化合物

第四节 不饱和链烃配合物

第五节 夹心型配合物

- 重点:有机金属化学范畴,配位分子的活化。
- 难点:分子轨道理论在有机金属化合物中的应用。

第四章 原子簇化学

第一节 团簇化学概括

第二节 硼、碳原子簇化学

- 重点:原子簇化合物基本概念,碳原子簇的结构、性能。
- 难点:团簇体系构效关系及其规律。

第五章 无机催化化学

第一节 无机催化基本概述

第二节 结构与催化性能相关性

第三节 光催化简述

- 重点:催化材料的基本组成、性能和应用,新型纳米催化材料的特性。
- 难点:光优化催化的设计思路。

第六章 无机固体材料学

第一节 物质对称性

第二节 固体材料的能带结构

第三节 固体材料的磁性

第四节 固体的缺陷和非整比化合物

第五节 无机材料功能性简介

- 重点:固体对称性的基础知识、对称操作和对称元素,分子点群,能带结构在研究无机固体性能中的应用。
- 难点:群的表示和特征标,自旋相互作用及其宏观磁性。

第七章 生物无机化学

第一节 生物无机化学概括

第二节 金属离子在生命体中的作用和生物固氮

- 重点:金属配合物在生命科学中的应用及发展前景。
- 难点:金属蛋白及其作用机制,化学模拟生物固氮。

第八章 超分子化学

第一节 超分子化学的简介

第二节 超分子化学的应用和发展前景

- 重点:超分子化学的基本概念。
- 难点:组装基元间弱键相互作用的协同规律,可控组装过程及调控规律。

第九章 计算材料导论

第一节 电子结构理论基础

第二节 电子结构理论与计算的应用

- 重点:常用的理论计算方法。
- 难点:DFT 理论中的简化与近似。

第十章 固体力学导论

第一节 固体力学简介

第二节 固体力学在材料中的应用

- 重点:固体本构方程,边界值问题;分叉与不稳定性,固体的破坏。
- 难点:超材料、材料强韧化,基于变形耦合的功能材料设计。

七、考核要求

考核方式及成绩评定:平时成绩占 30%~40%,期末考试成绩占 60%~70%。开卷考试(百

分制;平时成绩来源于课下作业、小论文和翻转课堂教学)。

八、编写成员名单

吴长征(中国科学技术大学)、郭宇桥(中国科学技术大学)、杨金龙(中国科学技术大学)

04 高等有机化学

一、课程概述

本课程系统介绍高等有机化学(物理有机化学)的基本概念和原理、典型有机化学反应的机理(包含基础有机化学的基础知识),是有机化学及相关专业研究生的必修课。本课程区别于有机合成化学类课程,不是介绍有机反应的类型或合成方法,而是讲授有机化学的基本原理、有机化学反应的机理以及对机理的研究方法。本课程理论性较强,所以对学生的有机化学和物理化学基础要求较高。

二、先修课程

基础有机化学、基础物理化学。

三、课程目标

修完本门课程后研究生需要掌握基本的有机化学原理和反应机理以及研究有机反应机理的基本方法。在基本原理部分,需掌握以下基本内容:化学键,热力学与动力学,反应和试剂,构性关系,溶剂效应,酸与碱、亲核、亲电试剂,同位素效应,立体与构象,催化。在有机反应机理部分需要掌握以下基本的反应类型及其机理:取代反应,极性加成,分子内的反应,有机过渡金属反应机理,周环反应,光反应。

四、适用对象

博士和硕士研究生(化学类有机化学专业研究生为主)。

五、授课方式

主要以讲授结合 PPT 为主,板书进行详细解释论证为辅。课堂需要与学生积极互动,包括介绍命名反应及其机理,利用所学知识推导文献报道最新反应的机制等。会进行随机随堂测验,以掌握学生对教学知识的掌握情况。要求学生做好课堂笔记。

六、课程内容

第一章 有机反应过渡态、能量、机理及相关问题

研究反应机理的方法及有关理论问题,包括过渡态理论、Hammond 假说、Curtin-Hammett 原理、动力学同位素效应、张力效应、场效应、中间体的捕获;取代基效应:取代基参数 σ 、反应参数 ρ 、线性自由能关系;诱导效应;共轭效应:超共轭效应、同共轭效应、螺共轭效应、异头效应。

第二章 溶剂效应及酸碱理论

溶剂极性及其对反应和化合物性质的影响;离子对;疏水亲脂效应,脂水分配系数;酸碱理论:软硬酸碱理论及实际应用;超分子包合作用。

第三章 周环反应(协同反应)

Mobius-Huckel 概论、节点、前线分子轨道(HOMO, LUMO)、轨道对称性守恒、对旋/同旋、同面/异面、久期行列式、分子轨道系数;周环反应:电环化反应、环加成与环消除反应、 σ -迁移反应、基团迁移反应、ene 反应、螯变反应;周环反应在化学合成中的立体控制应用。

第四章 立体化学

立体化学与化学反应;旋光活性测定与预测计算;旋光谱(ORD);圆二色谱(CD);八区率;其他谱学方法在立体化学研究中的应用(NMR、IR、UV、MS);超分子与立体化学;手性与手性分离。

第五章 有机反应活性中间体及研究方法

碳正离子、碳负离子、自由基、(阴、阳)离子自由基、碳烯、氮烯、苯炔、反芳香化合物、张力环及其他反应性。

第六章 催化反应和机理

催化氢化、催化氧化、催化羰基化、催化聚合、酶催化,机理描述的具体应用。

第七章 有机光化学和电化学

激发与激发态;激发态的失活及能量的传递;羰基化合物的光化学;烯与双烯的光化学;电子转移,阳极反应,阴极反应。

七、考核要求

闭卷考试(百分制;期末总评结合平时出勤和作业)。

八、编写成员名单

康彦彪(中国科学技术大学)、杨金龙(中国科学技术大学)

05 高等有机合成

一、课程概述

有机合成是有机化学学科的重要内容之一,是有机化学及相关化学专业研究生必修课程。通过学习使学生掌握有机合成中的新试剂、新方法、新反应、技术及有机化合物合成路线设计,并运用所学知识来解决合成中的实际问题。

二、先修课程

基础有机化学。

三、课程目标

高等有机合成是面向有机化学及相关化学专业研究生的一门重要基础理论课程,通过该课程的学习,使学生系统掌握有机合成化学的重要理论、概念、试剂、方法、反应、技术以及合成路线设计等基本知识;培养学生灵活运用有机化学知识,针对性分析问题和解决问题;为有机合成及相关化学专业研究生科研工作地开展打好理论基础。

四、适用对象

有机化学、生物、化学生物学、高分子化学、材料化学等学科的硕士研究生和博士研究生。

五、授课方式

班级授课,使用 ppt 讲解为主,重点难点内容讲解时辅以板书。

六、课程内容

第一章 选择性

1. 基本概念

化学选择性、区域选择性、立体选择性、立体专一、立体化学。

2. 控制化学反应的效应

立体效应、电子效应、立体电子效应。

3. 构象分析

非环 sp^3-sp^3 体系构象分析、非环 sp^3-sp^2 体系构象分析、环状体系构象分析、张力。

4. 有机反应的动力学和热力学分析

自由能关系、过渡态、分子内反应、Baldwin 规则、动力学和热力学控制、Hammond 假设、微观可逆原理、反应机理、构象效应对反应活性的影响、Curtin-Hammett 原理、Wagner-Meerwein 迁移、邻基参与、频哪酮重排反应。

第二章 氧化反应

1. 醇的氧化

金属氧化剂,非金属氧化剂。

2. 醛的氧化

亚氯酸钠、高锰酸钾、氧化银、PDC、Corey-Gilman-Ganem 氧化反应、溴。

3. 酮的氧化

Bayer-Villiger 氧化反应。

4. 碳-碳键的氧化断裂

高锰酸钾、钌试剂、臭氧化。

5. 烯烃环氧化反应

过氧化物诱发的环氧化反应、Sharpless 环氧化反应、Sharpless 不对称环氧化反应、过氧化氢氧化反应、Jacobsen 不对称环氧化、末端环氧的动力学拆分、手性相转移催化、酮催化的环氧化反应。

6. 烯烃双羟化反应

四氧化锇催化的双羟化反应、Sharpless 不对称双羟化反应、Sharpless 不对称羟胺化反应。

7. Wacker 氧化反应

第三章 还原反应

1. 催化氢化

杂多相催化氢化反应、均相催化氢化反应、烯烃的催化不对称氢化反应、酮的催化不对称氢化反应。

2. 氢转移反应

Meerwein-Ponndorf-Verley 还原反应、双亚胺。

3. 氢负离子还原

氢化铝锂(LiAlH_4 、 $\text{LiAlH}(\text{OEt})_3$ 、 $\text{LiAlH}(\text{OBu-t})_3$ 、 $\text{NaAlH}(\text{OBu-t})_3$ (STBA)、 $\text{NaAlH}_2(\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OMe})_2$ (Red Al)、 $i\text{-Bu}_2\text{AlH}$ (DIBAL or DIBAL-H)、硼氢化钠(NaBH_4 、 LiBH_4 、 $\text{Zn}(\text{BH}_4)_2$)、Luche 还原反应、 NaBH_3CN 、还原胺化、 LiBHEt_3 、Selectride、硼烷、有机硅烷)。

4. 金属或低价金属盐还原

碱金属。

5. 脱氧

羰基底物、羟基底物。

6. 脱卤

锌粉还原、三烷基锡基氢。

7. Barton 脱羧

8. 硼氢化反应

反应机理、区域选择性、非对映选择性、导向硼氢化反应、不对称硼氢化反应。

第四章 保护基

1. 羟基保护

醚保护基、硅醚保护基、酯和碳酸酯保护基、乙缩醛保护基、1,3-二醇的保护、酚的保护。

2. 羰基保护

二甲基半缩醛、二烷基二硫缩醛。

3. 羧基保护

酯。

4. 胺基保护

碳酸酯、苄胺、烯丙基、三芳基甲胺。

第五章 羰基和亚胺

1. 羰基和亚胺亲电试剂

部分电荷。

2. 有机金属试剂的非对映选择性加成反应

羰基加成模型(Cram 开链模型、Felkin-Anh 模型、Cram 螯合模型、取代环己酮的加成反应、手性轴控制的加成反应)。

3. 有机锌试剂对醛的加成

非线性效应。

4. 烯丙基化反应

烯丙基硼烷(硼酯)试剂、烯丙基硅试剂、烯丙基锡试剂。

5. 醛和酮的氰化反应

6. Henry 反应

7. 偶极反转反应

苯偶姻缩合、醛和乙酰基亚胺的交叉偶联反应、Stetter 反应、腭负离子。

8. 硫基碳正离子对羰基化合物的加成

硫叶立德、磺基碳负离子的片段耦合反应、1,3-二噻烷、Pummerer 重排反应。

9. 羰基碳鎓离子

亲核试剂对羰基碳鎓离子的加成反应、Prins 反应(Prins 环化反应、Prins-Pinacolone 重排反应、Petasis-Ferrier 重排反应)。

10. 亚胺和亚胺离子

亚胺正离子的生成、亚胺的催化不对称加成反应、多组分反应。

第六章 烯醇和烯胺

1. 烯醇的形成

酮-烯醇互变异构体、烯醇化合物形成的条件(Ireland 模型、软烯醇化体系)。

2. 烯醇烷基化反应

区域选择性、相对立体化学、含手性轴的烯醇化合物、Stevens 重排反应、催化不对称烷基化反应。

3. 烯醇酰基化、胺化及氧化反应

4. Aldol 反应

Zimmerman-Traxler 模型、手性醛的 Aldol 反应、手性酯的 Aldol 反应、含手性轴烯醇化合物参与的 Aldol 反应、金属中心手性控制的 Aldol 反应、催化不对称 Aldol 反应。

5. Mukaiyama Aldol 反应

反应机理、非对映选择性、催化不对称 Mukaiyama 反应。

6. 脱水反应

7. Mannich 反应

8. 烯胺

烯胺作为亲核试剂参与的反应、烯胺金属盐。

9. 烯胺催化

Aldol 反应、Mannich 反应、共轭加成反应、胺化反应、氧化反应、烷基化反应、卤化反应。

10. 烯胺正离子催化

Friedel-Crafts 反应、Mukaiyama-Michael 加成反应、氢负离子还原反应、环加成反应。

11. 串联烯胺正离子/烯胺催化

氢负离子还原/氟代反应、还原 Michael 环化反应、S-Michael/Aldol 缩合反应、Knoevenagel/Michael/Aldol 反应、环氧化反应、环丙烷化反应。

第七章 酰基化合物

1. 羧酸

合成酯的方法、Curtius 重排反应、Schmidt 反应。

2. 酯

水解、酯交换反应、Claisen 缩合反应、Dieckmann 缩合反应。

3. 酸酐

环状酸酐去对称化反应、单一催化剂催化的环状酸酐平行动力学拆分、消旋羧基酸酐的动力学拆分、二级醇的动力学拆分、内消旋二醇的去对称化反应。

4. 酰胺

通过重排反应合成酰胺、酰胺参与的反应。

5. N-乙酰基苯并三唑

6. Mander 试剂。

第八章 碳-碳多键

1. 羰基化合物烯化反应

Wittig 反应、Horner-Wadsworth-Emmons 烯化反应、Peterson 烯化反应、Tebbe 反应、Julia 烯化反应。

2. 复分解反应

烯烃复分解反应、烯炔复分解反应、炔炔复分解反应。

3. 卡宾重排合成炔烃

4. 碳-碳多键的亲电加成反应

5. 共轭加成反应

有机铜试剂、有机锌试剂、活化亚甲基化合物、Robinson 环化反应、Sakurai 反应、含氮亲核试剂。

6. MBH 反应

7. RC 活化烯烃二聚反应

第九章 周环反应

1. 电环化反应

电环化反应的 FMO 分析、逆电环化反应、Nazarov 环化反应、二烯基环丙烷重排反应。

2. 环加成反应

[2+2]环加成反应、Diels-Alder 反应、离子化 Diels-Alder 反应、Danishefsky 二烯、手性二烯、分子内 Diels-Alder 反应、手性轴控制的不对称 Diels-Alder 反应、催化立体选择性 Diels-Alder 反应、Ene 反应、双偶极环加成反应、[2+1]环加成反应。

3. Sigma 重排反应

[1,3]-Sigma 重排反应、[1,5]-Sigma 重排反应、[2,3]-Sigma 重排反应、[3,3]-Sigma 重排反应。

第十章 金属催化的有机合成反应

1. 交叉偶联反应

反应机理、Suzuki 反应、Negishi 反应、Stille 反应、Heck 反应、串联反应、Sonogashira 反应、Tsuji-Trost 反应、Ullmann 反应、Buchwald-Hartwig 交叉偶联反应。

2. Pauson-Khand 反应

3. 插羰环化反应

4. 金属卡宾环加成反应

Fisher 卡宾、偶氮卡宾、乃春。

第十一章 合成策略

1. 合成(基本概念)

全合成、半合成、形式全合成、仿生全合成、线性合成、汇聚式合成、发散式合成。

2. 反合成分析

3. 设计及执行全合成的步骤

4. 复杂有机分子的多步合成

合成示例。

■ 重点、难点: 构象分析、反应动力学和热力学分析、Sharpless 环氧化反应、Sharpless 双羟化反应、Cram 规则、Felkin-Anh 规则、偶极反转反应、Aldol 反应、Mukaiyama Aldol 反应、烯胺催化、烯胺正离子催化、平行动力学拆分、动态动力学拆分、Wittig 反应、Horner-Wadsworth-Emmons 烯化反应、复分解反应、前线轨道理论、电环化反应、环加成反应、重排反应、反合成分析、合成路线设计。

七、考核要求

闭卷考试。

八、编写成员名单

王细胜(中国科学技术大学)、田仕凯(中国科学技术大学)、杨金龙(中国科学技术大学)

06 高等分离分析

一、课程概述

本课程为分析化学研究生的核心课,也可作为相关专业研究生的专业普及课。分离分析是复杂体系研究与目标物质获取的必需方法与手段,本课程将重点介绍色谱、电泳、萃取、膜分离、吸附分离等现代分离分析的基本原理、方法、技术、应用与前沿。

二、先修课程

分析化学、物理化学、有机化学、仪器分析。

三、课程目标

通过本课程的学习,了解和掌握高等分离分析的基本理论、实验技术与方法,培养学生的科学思维能力,以及应用分离分析的方法与工具解决实际问题的能力。

四、适用对象

本课程主要为分析化学专业研究生的专业核心课,也可作为相关专业研究生的专业普及课。

五、授课方式

在教学方法上结合多媒体课件等手段,同时注重课堂讨论和互动。

六、课程内容

第一章 绪论

分离分析科学及其研究内容,分离分析科学的重要意义、发展历程、应用价值以及发展趋势,高等分离分析课程简介(包括课程设置及其作业、考试要求等)。

第二章 色谱法概述与色谱基本理论

色谱的发展历程,色谱法分类,色谱的基本理论,色谱基本关系式与主要专业名词,色谱基本装置,色谱的定性与定量分析概述。

第三章 高效液相色谱法

高效液相色谱分离模式与原理,高效液相色谱仪器,仪器的使用与维护简述,高效液相色谱柱,分离分析方法选择与建立,高效液相色谱技术应用,联用技术与最新进展。

第四章 气相色谱法

气相色谱分离原理,气相色谱仪器,气相色谱柱,气相色谱分离分析方法,气相色谱的应用及最新进展。

第五章 制备色谱技术

(1) 制备色谱基础,包括制备色谱的特点、制备分离的目标和策略。

(2) 制备色谱方法,包括制备薄层色谱、经典柱色谱、低压及中压制备色谱、高压制备液相色谱、高速逆流色谱、模拟移动床色谱、其他制备色谱方法。

第六章 天然产物以及生物大分子的分离与纯化

已知目标产物的分离纯化、未知目标产物的分离纯化,蛋白质的分离与纯化、核酸的分离纯化。

第七章 毛细管电泳及相关方法基础

电动分离基础理论;仪器装置、方法与技术,包括与质谱等鉴定技术联用装置。重点介绍基于毛细管和微流控芯片电泳、介电泳和电色谱方法。

第八章 毛细管电泳及相关方法应用

毛细管与微流控芯片电泳、介电泳、电色谱在分离分析中的应用及最新进展。

第九章 膜分离

(1) 膜分离概述包括膜材料,分离原理以及应用。

(2) 介绍微滤、超滤和纳滤;反渗透;透析;膜萃取;液膜分离等分离技术。

(3) 膜分离技术的最新进展。

第十章 萃取分离

(1) 萃取。萃取的基本原理和方法,重点介绍萃取技术的最新发展以及应用实例。

(2) 分离新材料与新方法。分子印迹聚合物、有机金属框架材料、核壳结构分离材料等在分离分析中的应用。

第十一章 其他分离技术

场流分离、水力学色谱、凝胶电泳、超高效液相色谱、离子色谱、超临界流体萃取及色谱、二维色谱及联用技术。

七、考核要求

采用平时成绩和期末考试综合考核方式。

成绩评定:成绩以百分制计算。课堂提问讨论表现及作业 30%,期末笔试 70%。

八、编写成员名单

赵睿(中国科学院)、白春礼(中国科学院)

07 高等高分子化学

一、课程概述

高分子化学是研究高分子结构、化学性质和相互转化的科学,聚合反应原理和高分子化学反应特性是它的基础内容,高分子结构对高分子化学过程的依赖性是其研究任务,性能

优良高分子材料的获取是它的根本目标。本科的“高分子化学”课程初步阐述和介绍了上述问题。

随着高分子学科的发展,许多新聚合方法和高效化学反应在分子合成方面得到广泛应用,对聚合反应机理的认识也越来越深入,对分子结构的合成调控能力越来越强。因此,作为分子学科各专业研究生的专业核心课程,高等分子化学不同于本科阶段的“高分子化学”课程,它在更深层次上阐明聚合反应的原理、分子多层次结构的调控方法、分子精准合成的思想、分子性能对多层次结构的依赖性,以此作为课程教学的主线。

为此,本课程教学内容分为三个部分。①分子合成化学原理:以可控自由基聚合为主体,介绍各种类型活性/可控聚合,阐述可控聚合“活性”化的原理、结构调控层次与聚合过程的对应关系;以点击化学反应为主体,介绍不同高效化学反应在分子合成方面的应用。②分子结构调控的合成策略:结合最新研究进展,以嵌段聚合物的嵌段序列和分子拓扑结构为主体,介绍分子链结构的合成调控思路;以复杂分子粒子的可控合成、多孔材料的合成和分子表面改性为主体,介绍分子相结构的合成调控思路;以自组装介导的可控聚合和可控聚合介导自组装合成方法为例,讲解物理原理与合成化学结合的思路。③特殊的聚合方法和特殊分子材料的合成方法,如模板聚合、酶/微生物介导的聚合、插层聚合等聚合方法,分子纳米杂合材料和高性能分子材料等。

通过上述内容的教学,加深学生对聚合反应原理的理解,促进学生把握分子合成化学中性质-结构-合成的统筹思考,帮助学生更好地开展论文工作。

二、先修课程

分子化学,分子物理,应熟练掌握逐步聚合、自由基链式聚合和共聚合的基本原理,以及分子链结构和多相结构的知识。物理化学,有机合成化学也是本课程的重要基础。

三、课程目标

修读完本课程的学生,应具备以下四个方面的知识和能力。①熟悉各类可控聚合反应,特别是它们的聚合机理、聚合体系和适用性,把握聚合反应过程和分子链结构层次调控的对应关系;熟悉在分子合成化学中使用广泛的高效化学反应。②熟悉非线性拓扑结构的分子类型和特性,能够依据分子的拓扑结构,结合各类可控聚合反应和高效化学反应,设计出合理、有效的合成途径;熟悉接枝改性的各种方法,掌握接枝密度、接枝链结构的调控原理。③在了解分子多相结构和相分离知识的基础上,掌握利用动力学控制的方法调控分子材料的外观、微观形态和多孔结构的基本原理,理解“自组装介导的可控聚合”和“可控聚合介导自组装”的本质。④了解合成分子材料的特殊聚合方法,加深理解聚合反应原理和分子结构调控原理;了解特殊分子材料及其合成途径。

总之,本课程目的在于指导研究生洞悉分子合成化学的各种手段,理解分子合成的相关原理以及结构-性能之间的相关性,学会从性能/性质分析到多层次结构设计,再到合成方案确定的研究方法,提升研究生的科研能力。

四、适用对象

适用于高分子学科的硕士和博士研究生,也涉及其他学科研究生,包括材料学科的复合材料、生物材料和纳米材料、材料表面与界面等方向,化学工程学科的化学分离工程方向。

五、授课方式

以教师课堂授课为主、课堂交流讨论为辅。教师着重知识体系的整体介绍、基本原理的阐述和科研思路的解析,通过课后作业和课后阅读等方式引导学生拓展知识面、熟悉知识点、了解最新进展。利用各类网络平台,设立课程教学的线上资源库,构建课程网络教学体系。

六、课程内容

课程主要内容,按章节分为如下几个部分。

第一章 绪论

高分子的多层次结构,本科课程回顾(分子量及其分布的控制原理,逐步聚合和链式聚合对高分子结构控制的异同,链式聚合的各基元反应与结构控制层次的关联,共聚反应与序列结构)。

第二章 活性聚合

活性聚合的基本特征,活性聚合对基元反应的要求,活性聚合的类型(非极性单体的活性阴离子聚合,基团转移聚合,活性开环聚合如环醚、内酯、内酰胺的开环聚合和 ROMP 开环易位聚合,活性配位聚合)。

第三章 可控链式聚合

可控聚合“活性”化的基本原理,可控自由基聚合(类型包括 Iniferter 聚合、以 TEMPO 聚合为代表的 NMP 氮氧化物介导可控聚合、ATRP 和 RAFT 聚合;聚合体系;聚合机理),可控阳离子聚合(类型、聚合体系、聚合机理),可控共聚合的特点。

第四章 可控逐步聚合

界面缩聚反应的再认识,可控逐步聚合反应的基本思想,可控逐步聚合的类型,可控超分子聚合。

第五章 高效化学反应

点击化学反应(端炔-叠氮、Diels-Alder 加成、巯基参入的点击反应等)、多组分化学反应、Michael 加成反应等在分子合成中的应用。

第六章 高分子拓扑结构及其合成策略

线形嵌段共聚物、星形聚合物、环状聚合物,树枝状聚合物的迭代法合成和超支化聚合物,自组装介导的可控合成。

第七章 表面接枝改性和内部形貌的调控

表面接枝聚合方法、接枝密度和接枝链结构的控制;高分子相分离基础,高分子多孔材料的形貌调控。

第八章 高分子粒子的可控合成

粒径单分散粒子的合成方法(无皂乳液聚合、微乳液聚合、分散聚合和种子聚合),复杂粒子

的合成(核壳聚合物粒子、异形聚合物粒子、Janus 聚合物粒子),可控聚合介导自组装合成方法。

第九章 特殊的聚合方法

模板聚合,晶相和固相聚合,酶催化的聚合反应和聚酯的生物合成技术,电化学聚合,冷冻聚合。

第十章 特殊高分子材料的合成方法

高分子纳米杂化材料和插层聚合,高性能高分子材料(高强度、高模量、耐高温),CO₂基聚碳酸酯,COF 共价有机 2D/3D 聚合物材料。

七、考核要求

(1) 课程考试:考核学生对课程知识的整体掌握程度和综合应用能力,根据考题的难易程度设定相应的合格标准。

(2) 课后作业:根据课程内容布置讨论题和相关文献阅读,考查学生对课程内容的即时理解和相关领域最新动态的了解。

(3) 文献综述报告:根据研究方向,研究生就相应领域提交文献综述,要求能较好总结归纳该领域的研究现状、关键问题及解决思路。

八、编写成员名单

尤业宇(中国科学技术大学)、何卫东(中国科学技术大学)、杨金龙(中国科学技术大学)

08 高分子凝聚态物理

一、课程概述

1920 年,Staudinger 提出了大分子假说:聚合物分子是由基本单元以共价键相连的。虽然这一假说在开始遭遇强烈的非议,但在 20 世纪 20 年代逐步为人们所接受,使这一领域在其后几年中取得重要进展。1929 年,Carothers 合成了一系列结构明确的合物,从此开启了聚合物的新世纪。

在此之后的 30 年(1930—1960 年),除从化学角度发展各类先进的合成方法外,也是高分子凝聚态物理基本概念建立的时期。以 Flory(1974 年诺贝尔奖获得者)为代表的科学家在所构建的理想链模型体系框架下,建立了高分子的熵和焓平均场理论,从而获得高分子在本体和溶液等环境下的自由能,使之能在经典统计物理框架下处理高分子凝聚态物理的复杂问题,为理解高分子的结构形成和演变及其与性能间的关系做出了非常重要的贡献。在 1960—1980 年的 20 年期间,以 de Gennes(1991 年诺贝尔奖获得者)为代表的科学家发展了近代高分子凝聚态物理理论,其根据高分子分形结构特点发展出 blob 模型及标度理论,在解决高分子凝聚态物理的复杂问题中显得更加简洁和优美。之后科学家在 高分子结晶和相分离、导电高分子、介电高分子

领域都有新的研究和进展。

通过本课程学习,将向研究生全面介绍和讲解近、现代高分子凝聚态物理内容。

二、先修课程

本课程适合本科为化学和物理专业的硕士和博士研究生。对应于本科化学专业的研究生,先修课程包括微积分和物理化学(I、II)或统计热力学;对应本科为物理专业的研究生,先修课程包括微积分和统计物理。

三、课程目标

本课程涉及早期高分子凝聚态物理的基础概念,包括 Kuhn 的大分子模型,Flory 良溶剂中单链溶胀理论,Huggins 和 Flory 的热力学理论,Flory 和 Stockmayer 的凝胶化理论,Kuhn、James 和 Guth 的橡胶弹性理论,还包括 Rouse 和 Zimm 的聚合物运动学单分子模型及近代高分子凝聚态物理理论。通过本课程学习,研究生将系统掌握近、现代高分子凝聚态物理理论和实验技术,将为探索化学和材料领域更深层次的研究打下坚实的基础。

四、适用对象

尽管本课程授课内容远超出普通高分子知识范围,但不需要学生具备高分子方面的知识。本课程对完全掌握高分子结晶、熔体、溶液和凝胶的动态和静态结构所必需的基本概念都将加以详细讲解。所以,本课程面向所有硕士和博士研究生,其中以化学学科与材料学科为主。

五、授课方式

板书和 PPT 结合。

六、课程内容

本课程分三个模块:高分子基础理论,高分子结晶,高分子共混合流变学,具体内容如下。

1. 高分子基础理论

(1) 在引论部分向非高分子专业学生介绍本课程所涉及必备的高分子基本概念。内容包括:均聚物与共聚物,聚合物构象的分形本质,聚合物的类型,高分子分子量分布,高分子分子量测定方法等。

- 重点:介绍与小分子显著差异的高分子多分散概念和高分子构象的分形本质。
- 难点:为高分子分形结构的理解。

(2) 第一部分介绍高分子单链构象,其中包括理想链和真实链两部分。

- 难点:高分子链自由能数学表达式的推导。

(3) 第二部分为高分子混合体系的热力学性质。内容包括:二元高分子体系混合熵和混合焓概念及数学表达式,混合体系相图,低组成混合体系自由能,渗透压,聚合物熔体,二元体系的实验探究;高分子溶液体系, θ 溶剂,良溶剂,不良溶剂,相关长度与链尺寸,亚浓 θ 溶液,多链吸附等。

- 难点:在低组分自由能数学表达及在解决具体问题中的相关应用。

(4) 第三部分为高分子交联网络和凝胶化。内容包括:无规支化与凝胶化,逾渗现象,凝胶化的平均场模型,凝胶点,低于凝胶点时数均摩尔质量,低于凝胶点的重均摩尔质量,理想无规支化聚合物的尺寸,截断函数,无规支化聚合物的尺寸与重叠。

■ 重点:介绍橡胶热力学,非缠结橡胶弹性理论,相似网络模型和幻影网络模型;缠结橡胶弹性理论,缠结与 Edward 管模型、Mooney-Rivlin 模型和约束涨落模型;聚合物凝胶溶胀,在 θ 溶剂中溶胀,无热溶剂中溶胀和在良溶剂中溶胀。

■ 难点:橡胶弹性理论中所涉及的数学推导过程。

(5) 第四部分为高分子链的构象转变及动力学。内容包括:非缠结高分子链动力学的 Rouse 模型及 Zimm 模型,特性黏度,非缠结亚浓溶液;高分子链动力学与温度关系,时温叠加原理,聚合物熔体转变;缠结聚合物动力学,聚合物熔体中高分子链的蠕动,亚浓溶液中高分子链的蠕动力学,松弛时间和扩散,应力松弛和黏度;缠结分子单链动力学的管子模型,固定障碍阵中的分子链,缠结星形聚合物,缠结线形聚合物熔体单元的位移和管长涨落;多链动力学的约束释放效应,松弛时间与扩散,应力松弛。

■ 难点:高分子管子模型中所涉及的数学推导。

2. 高分子结晶

目前工业高分子材料中,结晶性高分子材料占 2/3,不管从高分子材料加工和应用,还是从基础研究的角度,结晶是高分子材料最重要的相变之一。在 高分子结晶部分主要讲授如下内容。

(1) 高分子晶体的凝聚态结构

课程内容主要从高分子片晶和球晶两个高分子晶体最典型的结构尺度介绍。讲授内容从 Keller 关于折叠链片晶的发现和模型提出开始,引导学生了解、分析支持折叠链片晶模型的依据,同时对照介绍插线板模型以及不同模型之间的争议。而针对球晶形成的机理,课程同时介绍杂质扩散、位错、片晶旋转、分子拉伸成核等多种模型,引导学生自己去分析比较,而不是灌输单一结论。

(2) 晶体成核

首先从经典成核理论出发,除介绍该模型的基本物理图像外,还强调经典成核理论的假设和局限性。然后介绍非经典成核理论,包括扩散边界层和密度泛函理论,与经典成核理论形成对照。最后再进一步介绍新近发展的两步成核理论。

(3) 晶体生长

晶体生长主要介绍 Hoffman-Lauritzen 动力学模型,详细推导该模型中的片晶厚度和线性生长速率等物理参量。强调 HL 模型与经典成核理论的共性问题。

(4) 对 HL 模型的挑战

主要介绍 Strobl 的多步生长模型以及相关的实验证据、该模型与前面介绍的扩散边界层模型的相似性。

(5) 流动场诱导结晶

主要介绍流动场诱导结晶 Flory 的熵减模型和 Keller 的串晶形成模型,以及这些模型的缺陷和后期修正。

(6) 高分子结晶的展望

HL 等模型都是基于经典成核理论,继承了经典成核理论的优点和缺点。高分子结晶理论既需要吸收和借鉴新近发展的成核模型,也需要考虑高分子自身的特点。展望将从高分子链的柔顺性和连结性两个方面去讨论高分子结晶理论研究的发展方向。

3. 高分子共混合流变学

立足于聚合物共混物体系的相分离特性在流变学参数上的特殊响应,讲述根据聚烯烃共混体系在低频末端区的特殊黏弹性行为和平均场理论,通过流变学方法建立该体系在动态条件下的相图;将流变学参数的变化与相分离机理相联系,讲述不同组成、温度下相分离的动力学过程,揭示相分离过程中浓度涨落和界面张力共同作用的深刻物理内涵;在相分离和结晶的相互作用关系方面,分别介绍流变学、差示扫描量热法(DSC)和光散射等测试方法,重点关注相分离早期和后期以及不同相分离机制下,结晶与相分离之间的相互作用关系,进一步从不同角度和尺度上明晰这两种复杂行为背后隐藏的真实物理规律和相关条件,通过调控二者的相关条件变化,有效改善聚合物共混物的最终力学性能,为其生产加工提供科学依据和理论指导。

针对长链支化聚乳酸和聚碳酸酯的制备及流变学行为和结晶动力学和结晶形态演变等进行系统和深入的探讨,重点在于长链支化聚乳酸和聚碳酸酯的制备及分子链拓扑结构的调控,流变学手段表征其独特的松弛特性以及长链支化的引入所导致的在流变学、结晶动力学和结晶形貌上的显著变化,进一步讲述支化对拉伸和剪切行为的影响。

- 重点:长链支化对于聚合物流变学行为的影响。
- 难点:不同聚合物体系长链支化的具体实现方法和技巧。

七、考核要求

闭卷考试(百分制;期末总评结合平时作业和小论文)。

八、编写成员名单

梁好均(中国科学技术大学)、李良彬(中国科学技术大学)、王志刚(中国科学技术大学)、杨金龙(中国科学技术大学)

09 化学生物学

一、课程概述

化学生物学是一门多学科交叉的新兴学科,主题是用小分子去干预、调控生命过程,进而揭示生命过程的机理。化学生物学结合了有机化学、分析化学、生物化学、结构化学、超分子化学、药物化学和计算化学等多学科的理论和研究方法来研究生命科学和医学中的重大问题。化学生物学还处于快速发展过程中,其内容也在不断的扩充和更新。

二、先修课程

普通化学、分析化学、有机化学、基础生物化学。

三、课程目标

通过本课程的学习,希望学生能掌握化学生物学的基本概念、主要研究技术和方法,并能够较全面地了解化学生物学的应用和发展方向。

四、适用对象

化学生物学相关领域研究的博士和硕士研究生。

五、授课方式

在教学方法上板书和 PPT 相结合,同时注重课堂讨论和互动。

六、课程内容

第一章 绪论

1. 当今重大生命科学问题及其需要的化学工具
2. 化学生物学的基本概念和技术
3. 化学生物学的发展趋势和挑战

第二章 组学简介

1. 基因组学的起源、相关技术及应用实例
2. 蛋白质组学的起源、相关技术及应用实例
3. 其他新兴的组学技术:糖组学、脂类组学、代谢组学等

第三章 生物大分子的进化与合成生物学

1. 自然界的生物大分子进化
2. 人工控制的生物大分子进化的基本概念和思路
3. 合成生物学

第四章 化学遗传学和组合化学

1. 化学遗传学的基本概念
2. 小分子库的构建和高通量筛选
3. 多样性导向合成

第五章 药物设计与合成

1. 小分子药物的组合合成、筛选和分子模拟
2. 药物作用原理
3. 生物药物概述

第六章 分子修饰与生物成像技术

1. 生物大分子的修饰与标记
2. 分子探针和生物成像技术

3. 超分辨显微镜技术

第七章 生物催化

1. 生物催化的基本概念
2. 生物催化剂的筛选和改造
3. 人工酶
4. 生物催化的应用和前景

第八章 纳米生物技术

1. 纳米生物器件
2. 药物和基因的纳米载体
3. 纳米探针
4. 纳米免疫疗法

第九章 疾病诊断相关的化学生物学

1. 生物标记物检测技术
2. 单克隆抗体检测技术
3. 核酸适配体技术

第十章 化学生物学的新技术和新方法

1. 生物核磁
2. 生物质谱
3. 单分子、单细胞检测技术

第十一章 生命中的金属

1. 金属元素在细胞中的存在和作用
2. 基于金属元素的药物和分子探针

七、考核要求

期末开卷(或者闭卷)考核占 70%+其他(包括平时成绩、作业和小论文等)占 30%。

八、编写成员名单

刘扬中(中国科学院)、马明明(中国科学院)、闵元增(中国科学院)、石景(中国科学院)、肖斌(中国科学院)、白春礼(中国科学院)

10 化学动力学**一、课程概述**

化学动力学是研究化学反应及化学过程中的动力学现象、效应和微观作用机制的一门课

程,系统介绍化学动力学的基本概念和原理、典型化学反应的基元过程和机理解析、反应速率理论、光物理与光化学中的微观动力学机制;气相分子反应动力学和凝聚相动力学过程的基本概念、原理、实验方法和结果分析等。

本课程在化学学科研究生课程体系中具有重要的作用,可为相关专业博士和硕士研究生开展与化学动力学相关的研究工作打下坚实的理论基础。

二、先修课程

物理化学、结构化学、量子力学初步(或量子化学初步)等。

三、课程目标

通过本课程的学习,不仅可对气相和凝聚相化学动力学中的基本概念和原理、理论脉络和架构、实验技术和分析方法等有一个清楚的理解,而且可帮助博士和硕士研究生与涉及化学动力学相关专业的前沿交叉研究进行有效的对接。

四、适用对象

化学学科中物理化学(含化学物理)、光化学、分析化学等专业的博士和硕士研究生。

五、授课方式

结合国内外化学动力学最新研究动态和研究成果,将课堂教学与化学动力学研究及其应用结合起来进行教学;强调课堂启发式、互动式、参与式教学;在教学方法上,将结合板书、PPT、多媒体课件、视频材料等多种手段,突出该课程的基础性和应用交叉性的特点。

六、课程内容

第一章 绪论

1. 历史脉络
2. 研究现状

第二章 基元反应的速率理论和速率方程

1. 基本概念:反应速率、速率方程、速率常数
2. 典型速率方程: n 级反应、可逆反应、连续反应、平行反应
3. 平衡常数:热力学与动力学的联系
4. 细致平衡原理
5. 速率方程与反应机理关系:稳态近似、平衡浓度近似、速控步

第三章 气相动力学基本知识

1. 基本概念:速率分布概率、配分函数
2. 势能面:等值线图、鞍点、最低能量途径、分子势能函数

第四章 气相双分子反应速率理论

1. 简单碰撞理论:硬球碰撞模型、碰撞频率、碰撞参数、反应截面、反应阈能与活化能的关系、概率因子

2. 经典过渡态理论(活化络合物理论):基本假设的微观解释、反应速率常数、与简单碰撞理论的关系、热力学解释、活化络合物寿命

3. 变分过渡态理论:正则和微正则系综、状态数、态密度、量子效应修正

第五章 气相单分子反应速率理论

1. Lindemann 单分子反应速率理论:活化分子、速率常数的理论和实验验证

2. RRKM 单分子反应速率理论:分子能量自由流动、准平衡态、反应速率常数表达式、与过渡态理论的关系

第六章 散射与光激发

1. 量子散射:势散射中的平面波、分波法、WKB 近似、散射振幅等;共振散射;量子干涉

2. 分子的光激发:分子光吸收的振动模选择、电子激发态(含电离态、超激发态、Auger 过程)的基本规律及后续过程的动力学特征

第七章 能量与电荷传递

1. 单分子反应:分子内能量与电荷传递

2. 分子碰撞反应:分子间能量传递、离子-分子反应中的电荷传递

3. 氢原子(质子)转移:以分子内、分子间以及生化反应的相关过程为例介绍其主要特征

第八章 气相反应动力学实验技术

1. 分子束:超声射流、分子冷却、分子量子态和空间取向、分子团簇、激发态(含亚稳态)原子分子等

2. 谱学技术:光谱(吸收和发射)、各类质谱、能谱(ZEKE、REMPI、MATI)方法等

3. 动力学实验技术:角度分布测量(离子速度成像)、符合测量、相干控制等

第九章 凝聚相化学动力学简介

1. 凝聚相和界面体系基本概念:固体晶格和晶格振动、固体电子结构、表面势、液体的统计力学等

2. 凝聚相分子间相互作用:各种弱相互作用概念

第十章 凝聚相化学动力学的理论处理方法

1. 时间关联函数:扩散系数、黄金规则率、光学吸收线形、谐波振荡等

2. 凝聚相分子间相互作用随机过程及运动随机方程:时间演化、概率分布、谐波分析、朗之万方程、Fokker-Planck 方程等

3. 量子弛豫过程及量子力学密度算符:孤立分子弛豫、自发发射、弛豫与光谱线形、谐波振荡弛豫、稳态量子力学、共振隧道等

4. 线性响应理论:静态响应、弛豫和动力学响应、分子电子态间转变等

第十一章 凝聚相动力学过程

1. 振动能量弛豫:模型哈密顿构建、弛豫率、双线性作用模型、非线性作用模型、独立二元碰撞模型、多声子理论等

2. 溶剂化:介电效应、介电弛豫、德拜模型、溶剂化线性响应理论等

3. 电子和质子转移过程:连续介电理论、电子转移率、非绝热电子转移率分子理论、非绝热耦合、溶剂控制电子转移、跳跃机理、电子转移率的距离依赖性、Marcus 电子转移理论、质子转移等

4. 界面电子转移和传输:电化学电子转移、分子传导等
5. 凝聚相化学反应:单分子反应和过渡态理论简单回顾、非绝热转变过渡态理论、Kramers模型、非马尔可夫效应等

6. 催化、光催化、光化学相关方法

第十二章 凝聚相和界面体系的研究方法和结果分析

1. 复杂体相分子体系:光谱研究方法、共振拉曼散射、缀饰态表象、共振能量弛豫、热弛豫和去相干、非均匀光谱吸收带探测、光学响应函数、氢键的飞秒振动光谱研究等
2. 界面分子体系:界面分子结构与动力学研究技术、和频光谱、二次谐波、界面超快动力学等

第十三章 凝聚相超快光谱与动力学简介

1. 时间分辨光谱技术的发展:发轫及发展脉络
2. 时间分辨光谱研究的现状:国内外相关领域的研究现状

第十四章 飞秒激光技术原理

1. 超快脉冲的产生:锁模、Kerr Lensing、Self-Phase Modulation;脉冲展宽/压缩、啁啾;超连续白光等
2. 超快脉冲的测量:自相关、交叉相关;FROG/SPIDER等
3. 超快脉冲的调控:Pulse Shaping;Coherent Control等

第十五章 瞬态光谱基本概念及研究方法

1. 光谱的时域特征:动力学、寿命、量子拍频等
2. 光物理与光化学过程:辐射/非辐射/猝灭、电子/能量转移等
3. 飞秒泵浦-探测:工作原理、光学架构、数据分析方法等
4. 时间分辨荧光:工作原理、光学架构、数据分析方法等
5. 其他瞬态光谱研究方法:瞬态光栅、时间分辨偏振、光子回声、二维光谱等的工作原理、光学架构、数据分析方法等

第十六章 凝聚相超快光谱与动力学研究结果分析

1. 复杂化学体系:量子通道耦合动力学、光学暗态动力学等
2. 微纳材料体系:电荷转移动力学、激子动力学、等离激元动力学、陷阱态动力学等

■ 重点:①气相反应速率理论。主要包括经典过渡态理论(活化络合物理论)、变分过渡态理论、Lindemann 单分子反应理论、RRKM 单分子反应理论等;②凝聚相化学动力学的理论处理方法。主要包括时间关联函数、凝聚相分子间相互作用、量子弛豫过程及量子力学密度算符、线性响应理论等;③凝聚相动力学过程。主要包括振动能量弛豫、溶剂化效应、电子和质子转移过程、界面电子转移和传输、凝聚相化学反应、分子和材料体系中的超快光谱与动力学等。

■ 难点:凝聚相化学动力学的理论处理方法及凝聚相动力学过程的理解。

七、考核要求

期末开卷(或者闭卷)考核(70%)+其他(包括平时作业、小测验和小论文等)(30%)。

八、编写成员名单

张群(中国科学技术大学)、周晓国(中国科学技术大学)、蒋彬(中国科学技术大学)、田善喜(中国科学技术大学)、王兴安(中国科学技术大学)、叶树集(中国科学技术大学)

11 先进材料化学

一、课程概述

先进功能材料是一类具有特殊光、电、磁、化学以及生物功能的新型材料,是信息技术、生物技术、能源技术等重要国民经济领域的物质基础和先导。本课程将系统介绍能源转化与存储材料、智能材料、光电功能材料、磁性材料、低维材料、多孔材料等先进功能材料的结构与性能的基本关系,前沿发展动态及其应用。

通过本课程的学习,使学生掌握典型功能材料的基本原理及应用,使学生具有坚实的功能材料物理、化学基础,具有一定的材料实用方法的应用知识。在此基础上,使学生具备相关的文献查阅,获取和分析评述能力,拓展学生视野。

二、先修课程

无机化学、材料化学、高分子化学、物理化学、结构化学。

三、课程目标

通过本课程的学习,掌握先进功能材料的基础知识以及常规材料功能化的设计策略和构筑技术,了解先进材料的前沿动态,以及先进功能材料在环境污染控制、能源转化、生物技术、电子学等领域的应用,为相关专业研究生开展相关应用基础研究工作打下坚实的理论基础。

四、适用对象

化学学科和材料学科各专业博士和硕士研究生。

五、授课方式

采用讲座、专题报告与课堂教学相结合方式进行教学,课堂教学中将进一步与先进功能材料应用相结合,强调课堂启发式、互动式、参与式教学,在教学方法上结合 PPT 与多媒体课件、视频材料等手段,突出该课程基础与应用交叉的特点。

六、课程内容

第一章 先进陶瓷材料

第一节 结构陶瓷

第二节 介电/铁电/压电陶瓷

第三节 超导陶瓷

第四节 敏感陶瓷

第五节 光学陶瓷

第六节 磁性陶瓷

第七节 生物陶瓷

■ 重点:先进陶瓷概念、制备方法,结构陶瓷、电功能陶瓷(介电、铁电、压电、超导)、光功能陶瓷、磁性陶瓷、敏感陶瓷、生物陶瓷等的基本工作原理、材料要求与应用领域。

第二章 先进功能聚合物材料

第一节 导电聚合物

第二节 生物医用聚合物

第三节 光功能聚合物

第四节 液晶高分子

第五节 形状记忆聚合物

第六节 聚合物基复合材料

■ 重点:导电聚合物、生物医用、液晶、形状记忆、复合材料等功能聚合物材料分子结构特点、工作基本原理、应用与研究进展。

第三章 先进能源存储与转换材料

第一节 锂离子电池

第二节 超级电容器

第三节 燃料电池

第四节 太阳电池

第五节 光催化/电催化分解水

第六节 人工光合成

■ 重点:锂离子电池、超级电容器、燃料电池、太阳电池等各类电池的工作原理、关键材料及研究前沿,光/电催化分解水、 CO_2 转化的基本原理、材料要求及研究前沿。

第四章 有机光电功能材料与器件

第一节 光电功能材料与器件的发展趋势

第二节 光致发光与光致变色材料

第三节 电致发光材料与器件

第四节 太阳能电池材料与器件

第五节 力刺激、温度及其他发光响应材料

第六节 非线性光学与激光材料

■ 重点:介绍有机、高分子、金属-有机配合物光致发光材料、电致发光材料与器件、太阳能电

池材料与器件、光致变色材料、力刺激发光响应材料、温度及其他响应发光材料、非线性光学与激光材料、场效应晶体管材料、液晶材料、光电器件的基材等;介绍这些材料与器件的原理、应用与发展趋势。

第五章 低维功能材料

第一节 低维材料的物理基础

第二节 低维材料光学性质、磁学和超导性质、力学性质

第三节 二维层状材料大规模生长和表征

第四节 低维功能材料器件的制备原理和技术

第五节 低维材料在光、电、磁、能源催化与转化等领域的应用

■ 重点:介绍低维材料的量子力学和固体物理基础,以及低维材料结构与其光、电、磁、超导等性质,二维层状氧化物、氮化物、碳化物和硫化物的大规模制备,低维材料在光学器件、柔性电子、传感和复合材料、能源存储和转化中的应用。

第六章 智能材料

第一节 智能材料概述

第二节 智能形状记忆材料

第三节 智能磁致伸缩材料

第四节 智能压电材料

第五节 智能流变体

第六节 智能凝胶材料

第七节 仿生智能界面材料

■ 重点:智能材料的基础知识,仿生学构思,智能金属材料、无机非金属材料、高分子材料、复合/杂化等各系列智能材料的特点及应用领域,各类功能智能材料前沿进展。

第七章 磁性材料

第一节 磁学基础

第二节 磁学测试方法

第三节 单相和复合磁性材料

第四节 磁性材料应用及前言进展

■ 重点:基本的磁学及其微观理论基础,磁性的分类,磁性的测试方法,磁性材料的分类,常见的单相和复合磁性材料,磁性功能材料的性能和应用,磁性功能材料研究的前沿和发展趋势。

第八章 多孔材料

第一节 多孔材料概述

第二节 多孔材料的晶体学基础

第三节 沸石分子筛

第四节 有序介孔材料

第五节 金属-有机框架材料

第六节 共价有机框架材料

■ 重点:多孔材料的概念、分类,有序孔结构设计构筑理念,沸石、MOF、COF 等多孔材料的组成、结构特点与应用领域。

七、考核要求

期末开卷(或者闭卷)考核占 70%+其他(包括文献阅读、作业和小论文等)占 30%。

八、编写成员名单

童明良(中山大学)、潘梅(中山大学)、池振国(中山大学)、李满荣(中山大学)、石建英(中山大学)、陈洪燕(中山大学)

12 高等结构化学

一、课程概述

结构化学是研究原子、分子、晶体的微观结构,以及物质的结构与性能关系的科学。本课程旨在大学结构化学的基础上,进一步加强在量子力学原理、分子和固体的电子结构等方面的知识,主要讲授原子结构与原子光谱、分子结构与分子光谱、晶体结构、能带理论、表面与缺陷等内容。

本课程是物理化学(含化学物理)方向研究生的核心课程。材料化学等其他二级学科的硕士研究生也可以选修本课程。

二、先修课程

结构化学、物理化学。

三、课程目标

通过本课程的学习,掌握微观物质运动的基本规律,获得原子、分子、团簇、固体的几何结构和电子结构的理论知识,更好地理解物质的结构与性能的关系,掌握研究分子和固体结构的实验技术并了解相关领域的研究前沿。

四、适用对象

本专业硕士研究生。

五、授课方式

课堂讲授,采用电子课件结合板书等方法。

六、课程内容

1. 原子与量子

(1) 量子力学基本原理

(2) 变分法与微扰理论

(3) 多电子原子的能级结构

(4) 原子光谱及应用

2. 分子、团簇与配位化合物

(1) 分子对称性、点群和群表示理论

(2) 分子电子结构:价键理论和分子轨道理论

(3) 单分子化学物理

(4) 团簇结构化学

(5) 配位化合物及配位场理论

(6) 分子光谱及应用

3. 晶体结合、结构与振动

(1) 金属键、离子键、共价键、次级键等类型晶体结合

(2) 晶格的周期性与对称性

(3) 倒易点阵与布里渊区

(4) 晶格振动的量子化与固体比热

(5) 晶体结构和晶体振动的实验技术

4. 固体的电子结构

(1) 金属自由电子论

(2) Bloch 定理

(3) 近自由电子近似

(4) 紧束缚近似

(5) 能带对称性、态密度和费米面

(6) 绝缘体和半导体的能带论

(7) 现代能带计算方法与计算实例

5. 表面与缺陷

(1) 晶体表面、表面再构与表面态

(2) 晶体缺陷与缺陷态

(3) 表面界面科学实验表征技术原理与实例

■ 重点:晶格的周期性和对称性、能带理论。

■ 难点:晶格的对称性、倒易空间。

七、考核要求

考核方式为笔试(闭卷),侧重对基础知识的理解。

八、编写成员名单

陈东明(中国科学技术大学)、李群祥(中国科学技术大学)、杨金龙(中国科学技术大学)

13 量子化学

一、课程概述

量子化学是以量子力学的原理和方法为基础,在微观层次研究各种化学和材料学问题的科学。量子化学与化学的其他分支相互交叉渗透,是化学和材料科学理论的重要组成部分。本课程主要讲授量子力学基本原理、原子和分子电子结构、分子对称性与群论基础、多原子分子的电子结构与化学键、量子化学计算方法等。

本课程是物理化学(含化学物理)方向研究生的核心课程。通过本课程的学习,不仅使学生系统掌握量子化学的相关知识,也为反应动力学、分子光谱学等课程的学习奠定基础。化学其他二级学科的硕士研究生也可以选修本课程。

二、先修课程

微积分、线性代数、化学原理。

三、课程目标

通过本课程的学习,使学生掌握量子力学基本原理和相关知识;能够应用变分和微扰等方法,通过求解原子和分子的薛定谔方程,分析原子和分子的电子结构;能够运用群论和分子轨道理论定性或半定量处理分子的结构和化学键等问题;了解 Hartree—Fock 方法、组态相互作用、密度泛函理论等量子化学计算方法的基本原理,运用量子化学计算方法研究原子和分子的结构和性质及化学反应的微观机理。

四、适用对象

化学学科硕士研究生。

五、授课方式

课堂讲授,采用电子课件结合板书等方法。

六、课程内容

1. 量子力学基础

- (1) 微观粒子波粒二象性与波函数
- (2) Schrodinger 方程及简单体系的定态解
- (3) 力学量算符
- (4) 量子力学基本假设
- (5) 轨道角动量

2. 原子结构

- (1) 单电子原子
- (2) 电子自旋、泡利原理
- (3) 多电子原子的原子轨道
- (4) 变分法、氦原子的变分处理
- (5) 定态微扰理论
- (6) 多电子原子的电子组态与原子光谱项

3. 双原子分子的电子结构

- (1) 电子运动与核运动的分离
- (2) 线性变分法及氢分子离子的线性变分处理
- (3) 分子轨道理论要义
- (4) 典型双原子分子的电子结构

4. 分子的对称性与群论基础

- (1) 分子的几何对称性、对称操作与对称元素
- (2) 群的基本概念
- (3) 分子点群
- (4) 对称操作的矩阵表示
- (5) 群的表示、可约与不可约表示、特征标表
- (6) 不可约表示的性质、可约表示的约化
- (7) 群论与量子力学

5. 多原子分子的电子结构

- (1) 简单多原子分子的定性分子轨道法处理
- (2) 多原子分子的休克尔分子轨道法处理
- (3) 金属配合物的电子结构与化学键

6. 自洽场-分子轨道(SCF-MO)方法

- (1) 行列式波函数及其性质
- (2) Hartree—Fock 方程
- (3) Roothaan 方程
- (4) 分子性质的自洽场-分子轨道计算
- (5) 基函数
- (6) 闭壳层和开壳层体系的自洽场-分子轨道计算

7. 电子相关计算概要

- (1) 电子相关问题及其处理
- (2) 组态相互作用
- (3) 多体微扰理论
- (4) 密度泛函理论
- (5) 电子相关方法的应用

- 重点:量子力学基础、分子对称性与群论基础、自洽场-分子轨道法。
- 难点:量子力学基本假设、群的表示理论、电子相关计算。

七、考核要求

考核方式为笔试(闭卷),侧重基础知识的考查。第1~3部分占40%,第4~5部分占30%,第6~7部分占30%。

八、编写成员名单

陈东明(中国科学技术大学)、田善喜(中国科学技术大学)、廖结楼(中国科学技术大学)、李群祥(中国科学技术大学)、胡水明(中国科学技术大学)