清华大学基础分子科学中心

地址：清华大学蒙民伟科技大楼南楼 6/9/10层

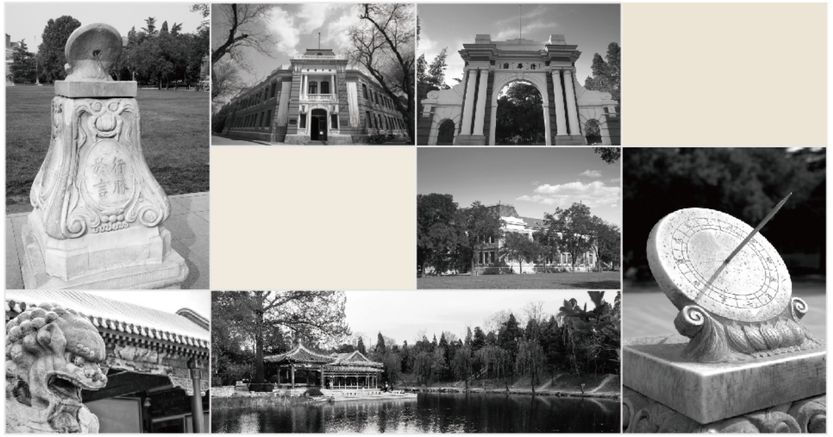
网址：http://cbms.chem.tsinghua.edu.cn/

电话：010-62787136

邮编：100084

清华大学
基础分子科学中心

Center of Basic Molecular Science, Tsinghua University



清華大學
Tsinghua University

自强不息 · 厚德载物

目录 CONTENTS

中心介绍 01
CBMS OVERVIEW

成员介绍 03
FACULTY MEMBERS

学术交流 13
ACADEMIC EVENTS

科研条件 15
RESEARCH FACILITIES

教书育人 17
CBMS ACTIVITIES

i BonD 键能数据库 19
internet Bond-energy Databank

01 中心介绍

简介

清华大学基础分子科学中心于2012年由程津培院士领衔创立。中心秉持“即物穷理”的研究理念，致力于打造成为具有重要学术影响力的物理有机化学前沿研究中心。中心在分子科学的多个研究领域开展基础性、创新性的科研工作，包括化学键能量的基础理论研究以及新物质合成和反应规律研究等。中心现有教授2人，副教授5人，副研究员1人，助理研究员2人。其中包括中国科学院院士1人，基金委“杰出青年科学基金”获得者1人，中组部青年千人计划入选者5人，国家基金委优秀青年基金获得者2人，中心现任主任罗三中教授。

基础分子科学中心以物理有机化学研究为核心，坚持展开以物理有机化学为指导的分子科学领域的基础研究。在开展关于物质结构、能量、反应活性标度等方向基础研究的同时，注重其与合成化学、分析化学、材料化学及能源化学的相互结合和促进，通过对物质分子结构及其重建的定量研究与理论归纳，发展对物质的创造及转化具有指导作用的新方法、新理论。中心的目标是建设世界一流的物理有机化学研究中心和人才培养基地，促进物理有机化学在理论及应用两方面的发展，培养具有理性认知和实践能力的创新人才。

自成立以来，中心建立了一流的科研支持保障平台，主持和承担了国家自然科学基金委重大项目，科技部重大专项，中组部万人计划领军人才和青年拔尖人才，以及多项国家自然科学基金委员会面上项目和国际合作项目等，逐渐形成了高水平的科研创新平台。

02 成员介绍

程津培 教授 中国科学院院士

程津培院士，1948年6月出生，籍贯江苏连云港。1975年毕业于天津师范学院，1981年获南开大学硕士，1987年获美国西北大学博士，1987–1988年在美国杜克大学从事博士后研究，1991–1997年先后在犹他州立大学、杜克大学、香港大学做访问教授，1995–2000年任南开大学副校长，2000–2008年担任国家科技部副部长，2001年当选为中国科学院院士、第三世界科学院院士（TWAS），2005年获得何梁何利科学与技术进步奖，2012年8月担任天津化学化工协同创新中心副理事长，2012年获中国化学会–中国石油化工股份有限公司化学贡献奖。2012年12月受聘于清华大学，建立基础分子科学中心。2013年获中国化学会物理有机成就奖。现任国家教育咨询委员会委员、国家科技奖励委员会委员、国家科技图书文献中心理事长、欧美同学会副会长等职。

电话：86-10-62796217　　邮箱：jinpei_cheng@mail.tsinghua.edu.cn

程津培课题组

主要从事物理有机化学研究，在应用化学键能研究方法学和键能的实验测定、自由基取代基效应理论、一氧化氮（NO）亲合势和转移机理、NADH 辅酶模型反应热力学和机理、叶立德（Ylide）热力学稳定性统一标度的建立和有机催化等方面做出了系统的、创新性的工作。2016 年，建立了迄今全球最完整权威的智能型化学键能数据库 *i* BonD，向国内外学界提供免费服务，受到广泛赞誉。

Selected Publications:

1. Cheng, J.-P., *et al.*, The Most Comprehensive Bond Dissociation Energy Databank-iBonD, **2016**, http://ibond.chem.tsinghua.edu.cn; http://ibond.nankai.edu.cn.
2. Yang, J.-D.; Xue, J.; Cheng, J.-P.* Understanding the Role of Thermodynamics in Catalytic Imine Reductions, *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 2913-2926.
3. Yang, J.-D.; Ji, P.; Xue, X.-S.; Cheng, J.-P.* Recent Advances and Advisable Applications of Bond Energetics in Organic Chemistry, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 8611–8623.
4. Wang, Z.; Gao, F.-X.; Ji, P.*; Cheng, J.-P.* Unexpected Solvation-stabilisation of Ions in a Protic Ionic Liquid: Insights Disclosed by a Bond Energetic Study. *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 3538–3543.
5. Xue, X.-S.; Ji, P.; Zhou, B.-Y.; Cheng, J.-P.* The Essential Role of Bond Energetics in C–H Activation/Functionalization, *Chem. Rev.* **2017**, *117*, 8622–8648.
6. Mao, C.; Wang, Z.-D.; Wang, Z.; Ji, P.*; Cheng, J.-P.* Weakly Polar Aprotic Ionic Liquids Acting as Strong Dissociating Solvent: A Typical "Ionic Liquid Effect" Revealed by Accurate Measurement of Absolute pKa of Ylide Precursor Salts. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 5523–5526.

罗三中 教授 博士生导师

罗三中，1999年本科毕业于郑州大学；2002在南开大学获硕士学位；2005年在中国科学院化学研究所获博士学位；2004–2005年在俄亥俄州立大学访学；2005年始在中国科学院化学研究所工作；2007年晋升为副研究员、课题组长；2009年在斯坦福大学做访问学者；2010年获国家杰出青年基金资助；2011年晋升为研究员。罗三中教授先后获得中国化学会青年化学家奖、中国科学院卢嘉锡青年人才奖、亚洲核心计划讲学奖、Thieme化学期刊奖、中国青年五四奖章、中国化学会手性青年化学奖、中国化学会物理有机化学青年奖等诸多奖项，并获得中组部青年拔尖人才计划，万人计划领军人才，科技部中青年科技创新领军人才等人才计划支持。2017年8月调入清华大学工作，现任基础分子科学中心主任。

电话：86-10-62781395　　邮箱：luosz@tsinghua.edu.cn

罗三中课题组

研究工作以发展新型分子催化体系为核心，开拓其催化合成应用，探讨催化剂理性设计。道法自然，致力于以自然界催化策略和机制为蓝本，设计发展全新、广普适用的仿生小分子催化体系，研究其在功能小分子、超分子和功能材料催化合成中的应用，探究其催化机制和规律，挖掘小分子催化生物功能与生命起源意义。近年来，分别发展了仿生手性伯胺催化、手性双酸催化、手性碳正离子催化和仿生邻醌催化剂。

Selected Publications:

1. Zhu, L.; Zhang, L.; Luo, S.* Catalytic Desymmetrizing Dehydrogenation of 4-Substituted Cyclohexanones through Enamine Oxidation *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 2253-2258.
2. You, Y.; Zhang, L.; Cui, L.; Mi, X.; Luo, S.* Catalytic Asymmetric Mannich Reaction with N-Carbamoyl Imine Surrogates of Formaldehyde and Glyoxylate *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 13814-13818.
3. Zhou, H.; Wang, Y.; Zhang, L.; Cai, M.; Luo, S.* Enantioselective Terminal Addition to Allenes by Dual Chiral Primary Amine/Palladium Catalysis *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 3631-3634.
4. Yang, Q.; Zhang, L.; Ye, C.; Luo, S.*; Wu, L.-Z.*; Tung, C.-H. Visible-Light-Promoted Asymmetric Cross-Dehydrogenative Coupling of Tertiary Amines to Ketones by Synergistic Multiple Catalysis. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 3694-3698.
5. Zhu, Y.; Zhang, L.; Luo, S.* Asymmetric Retro-Claisen Reaction by Chiral Primary Amine Catalysis *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 3978-3981.

焦雷 副教授 博士生导师

焦雷，1983年1月生于北京。2001年进入北京大学学习化学，2005年毕业获学士学位。2005年进入北京大学化学与分子工程学院余志祥教授实验室攻读博士学位，在有机合成化学与计算有机化学方向开展研究工作。2010年获得博士学位后在德国洪堡奖学金的资助下进入慕尼黑工业大学化学系 Prof. Thorsten Bach 实验室进行博士后研究，主要研究方向为过渡金属催化的碳—氢键活化反应。2013年底回国加入清华大学基础分子科学中心开展独立研究工作。焦雷博士曾获2008年罗氏化学创新奖，2010年礼来亚洲优秀研究生论文奖一等奖，2012年全国优秀博士学位论文，2014年 Thieme Chemistry Journals Award，2015年求是杰出青年学者奖，以及2017年中国化学会–物理有机化学新人奖。

电话：86-10-62788874　　邮箱：Leijiao@mail.tsinghua.edu.cn

焦雷课题组

主要研究方向是机理研究指导的新反应、新催化剂设计，期望在对反应机理及构效关系深入认识的基础上发展新催化剂以及新反应体系，实现对重要有机反应活性、选择性和催化体系稳定性的理性设计与调控。

Selected Publications:

1. Zhang, L.; Jiao, L.* Visible-Light-Induced Organocatalytic Borylation of Aryl Chlorides. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 9124–9128.
2. Zhang, L.; Jiao, L.* Super Electron Donors Derived from Diboron. *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 2711–2722.
3. Yang, H.; Chu, D.-Z.; Jiao, L.* Aromatization Modulates the Activity of Small Organic Molecules as Promoters for Carbon–Halogen Bond Activation. *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 1534–1539.
4. Zhang, L.; Jiao, L.* Pyridine-Catalyzed Radical Borylation of Aryl Halides. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 607–610.
5. Zhang, L.;Yang, H.; Jiao, L.* Revisiting the Radical Initiation Mechanism of the Diamine-Promoted Transition-Metal-Free Cross-Coupling Reaction. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 7151–7160.
6. Zhang, Z.-X.; Chen, S.-C.; Jiao, L.* Total Synthesis of (+)-Minfiensine: Construction of the Tetracyclic Core Structure by an Asymmetric Cascade Cyclization. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, 55, 8090–8094.

章名田 副教授 博士生导师

章名田，1981年8月生于歙县（徽州），博士生导师。2008年获南开大学理学博士学位。2009–2011年在瑞典乌普萨拉大学（Uppsala University）光化学与分子科学系 Prof. Leif Hammarström 实验室进行博士后研究，主要研究方向为质子耦合电子转移反应机理。2012年2月进入北卡罗来纳大学教堂山分校（UNC-Chapel Hill）化学系 Prof. Thomas J. Meyer 实验室开展太阳能化学转换和催化的机理研究。2013年11月回国加入清华大学基础分子科学中心开展独立研究工作。

电话：86-10-62783624　　邮箱：mtzhang@mail.tsinghua.edu.cn

章名田课题组

致力于将物理有机和物理无机化学方法应用于能源催化中关键转化过程的机理研究，并在机理的基础上发展光 / 电催化体系应用于人工光合作用体系构筑。目前的主要研究领域包括：

(1)光/电催化分解水及CO_2还原催化与机制的研究；(2) 质子耦合电子转移反应机理及应用。

Selected Publications:

1. Du, H.-Y.; Chen, S.-C.; Su, X.-J.; Jiao, L.*; Zhang, M.-T.* Redox-Active Ligand Assisted Multielectron Catalysis: A Case of CoIII Complex as Water Oxidation Catalyst. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 1557-1565.
2. Hu, Q.-Q.; Su, X.-J.; Zhang, M.-T.* Electrocatalytic Water Oxidation by an Unsymmetrical Di-Copper Complex. *Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 10481-10484.
3. Yong, W.-W.; Lu, H.; Li, H.; Wang, S.*; Zhang, M.-T.* Photocatalytic Hydrogen Production with Conjugated Polymers as Photosensitizers. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2018**, *10*, 10828-10834.
4. Li, H.; Zhang, M.-T.* Tuning Excited - State Reactivity by Proton - Coupled Electron Transfer. *Angew Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 13132-3136.
5. Su, X.-J.; Gao, M.; Jiao, L.; Liao, R.-Z.*; Siegbahn, P. E. M.; Cheng, J.-P.; Zhang, M.-T.* Electrocatalytic Water Oxidation by a Dinuclear Copper Complex in a Neutral Aqueous Solution. *Angew Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 4909-4914.

刘强 副教授 博士生导师

刘强，2007年本科毕业于武汉大学；2012在武汉大学获博士学位；2012–2015年在德国莱布尼茨催化研究所从事博士后研究；2015开始在清华大学化学系工作至今。主要荣誉包括入选中国优秀博士代表团受邀参加德国林岛诺贝尔奖得主大会（2010），德国洪堡奖学金（2012），中组部千人计划青年项目（2015），Thieme Chemistry Journals Award（2017），国家自然科学基金委优秀青年基金获得者（2018）。

电话：86-10-62796906　　邮箱：qiang_liu@mail.tsinghua.edu.cn

刘强课题组

主要研究方向为廉价金属催化剂的设计、合成及其在负氢转移反应中的应用。研究目标是利用高效的催化负氢转移反应实现基础化学品的绿色合成、生物质转化和能源转换系统的构建。

Selected Publications:

1. Z. Shao, Y. Li, C. Liu, W. Ai, S. Luo, Q. Liu*, Reversible Interconversion between Methanol-Diamine and Diamide for Hydrogen Storage Based on Manganese Catalyzed [de]Hydrogenation, *Nat. Commun.* **2020**, *11*, 591-597.
2. Y. Wang, L, Zhu, Z. Shao, Y. Lan*, Q. Liu*, Unmasking the Ligand Effect in Manganese-Catalyzed Hydrogenation: Mechanistic Insight and Catalytic Application, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 17337-17349.
3. X. Liu, W. Zhang, Y. Wang, Z-X. Zhang, Lei Jiao*, Q. Liu*, Cobalt-Catalyzed Regioselective Olefin Isomerization Under Kinetic Control, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 6873–6882.
4. S. Fu, Z. Shao, Y. Wang, Q. Liu*, Manganese-Catalyzed Upgrading of Ethanol into 1-Butanol, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 11941–11948.
5. S. Fu, N. Chen, X. Liu, Z. Shao, S. Luo*, Q. Liu*, Ligand-Controlled Cobalt-Catalyzed Transfer Hydrogenation of Alkynes: Stereodivergent Synthesis of Z- and E-Alkenes, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 8588–8594.

李必杰 副教授 博士生导师

李必杰，1984年12月生于湖北黄冈。2003年进入北京大学化学学院学习，2007年毕业获得学士学位。同年进入北京大学化学学院施章杰教授课题组攻读博士，并于2012年获得博士学位。2012年8月加入美国加州大学伯克利分校 Prof. John Hartwig 实验室开展博士后研究。2015年8月进入清华大学基础分子科学中心开展独立研究工作。入选2015年中组部青年千人计划，获得了2017年 Thieme Chemistry Journal Award 及2019年中国化学会青年化学奖。

电话：86-10-62796627　　邮箱：bijieli@mail.tsinghua.edu.cn

李必杰课题组

研究方向是不对称催化中新催化剂的开发及新反应模式的发现。研究目标是通过过渡金属催化发展新颖、实用的不对称催化合成方法，为手性天然产物、药物分子提供高效合成途径。

Selected Publications:

1. Wang, Z.-X.; Li, B.-J.* Construction of Acyclic Quaternary Carbon Stereocenters by Catalytic Asymmetric Hydroalkynylation of Unactivated Alkenes. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 9312.
2. Gao, T.-T.; Zhang, W.-W.; Sun, X.; Lu, H.-X.; Li, B.-J.* Stereodivergent Synthesis through Catalytic Asymmetric Reversed Hydroboration. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 4670.
3. Bai, X.-Y.; Zhang, W.-W.; Li, Q.; Li, B.-J.* Highly Enantioselective Synthesis of Propargyl Amides through Rh-Catalyzed Asymmetric Hydroalkynylation of Enamides: Scope, Mechanism, and Origin of Selectivity. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 506.
4. Wang, Z.-X.; Bai, X.-Y.; Yao, H.-C.; Li, B.-J.* Synthesis of Amides with Remote Stereocenters by Catalytic Asymmetric γ-Alkynylation of α,β-Unsaturated Amides. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 14872.
5. Bai, X.-Y.; Wang, Z.-X.; Li, B.-J.* Iridium-Catalyzed Enantioselective Hydroalkynylation of Enamides for the Synthesis of Homopropargyl Amides. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 9007.

郭兴伟 副教授 博士生导师

郭兴伟，1985年1月生于河北秦皇岛。2007年毕业于河北工业大学应用化学系，同年进入中国人民大学化学系李志平教授实验室，于2010年取得硕士学位。随后赴德国慕尼黑大学化学系学习，进入国际著名物理有机化学家Herbert Mayr教授实验室攻读博士学位，从事醌的反应动力学及机理研究。2014年获得博士学位后进入法国国家科学研究中心（CNRS）Samir Z. Zard教授实验室开展博士后研究，研究方向为自由基化学。2015年进入瑞士巴塞尔大学化学系Oliver S. Wenger教授实验室，从事光诱导电子转移方面的博士后研究。2019年回国加入清华大学基础分子科学中心，开展独立研究工作。郭兴伟博士曾获2010年中国人民大学优秀硕士学位论文，2014年德国慕尼黑大学Römer基金会优秀博士生奖，德国慕尼黑大学最高荣誉博士学位。

电话：86-10-62787136　　邮箱：xingwei_guo@mail.tsinghua.edu.cn

郭兴伟课题组

致力于以反应动力学为核心的物理有机化学研究，以解决当代分子科学前沿领域中的一些重要基础科学问题。主要研究领域为：（1）自由基反应动力学模型；（2）光催化；（3）外场调控与电场仿生催化。

Selected Publications:

1. Unexpected Hydrated Electron Source for Preparative Visible-Light Driven Photoredox Catalysis Kerzig, C.*, Guo, X.; Wenger, O. S.* *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 2122-2127.
2. Enantioselective Synthesis of Amines by Combining Photoredox and Enzymatic Catalysis in a Cyclic Reaction Network Guo, X.; Okamoto, Y.; Schreier, M.; Ward, T. R.*; Wenger, O. S.* *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 5052-5056.
3. Reductive Amination by Photoredox Catalysis and Polarity-Matched Hydrogen Atom Transfer Guo, X.*; Wenger, O. S.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 2469-2473.
4. Mixed-Valent Molecular Triple Deckers Schmidt, H. C.; Guo, X.; Richard, P. U.; Neuburger, M.; Palivan, C. G.*; Wenger, O. S.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 11688-11691.
5. A Tris(diisocyanide)chromium(0) Complex is a Luminescent Analog of $[Fe(2,2'\text{-Bipyridine})_3]^{2+}$ Büldt, L. A.; Guo, X.; Raphael, V.; Prescimone, A.; Wenger, O. S.* *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 985-992.
6. A Molybdenum(0) Isocyanide Analog of $Ru(2,2'\text{-Bipyridine})_3^{2+}$: Strong Reductant for Photoredox Catalysis BülTdt, L. A.; Guo, X.; Prescimone, A.; Wenger, O. S.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 11247-11250.

张龙 副研究员

张龙，2005年本科毕业于南开大学化学学院，2010年博士毕业于南开大学化学学院，师从程津培院士，2006–2010年期间在中国科学院化学研究所罗三中课题组进行联合培养博士研究。2010年加入中国科学院化学研究所工作，任助理研究员，2013年始任副研究员，2018年1月加入清华大学化学系基础分子科学中心工作。

研究兴趣：反应机理，理论计算化学。

电话：86-10-62787136　　邮箱：zhanglong@mail.tsinghua.edu.cn

Selected Publications:

1. Zhang, R.; Qin, Y.; Zhang, L.;* Luo, S.* "Mechanistic Studies on Bioinspired Aerobic C–H Oxidation of Amines with an ortho-Quinone Catalyst", *J. Org. Chem.* **2019**, *84*, 2542-2555.
2. Wang, Y.; Zhou, H.; Yang, K.; You, C.; Zhang, L.;* Luo, S.* The Steric Effect of Protonated Tertiary Amine in Primary-Tertiary Diamine Catalysis: A Double-Layered Sterimol Model, *Org. Lett.* **2019**, *21*, 407-411.
3. Qiao, Y.; Zhang, L.;* Li, J.; Lin, W.; Wang, Z.* Switching on Supramolecular Catalysis via Cavity Mediation and Electrostatic Regulation, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 12778-12782.
4. Zhang, L.; Fu, N.; Luo, S.* Pushing the Limits of Aminocatalysis: Enantioselective Transformations of α-Branched β-Ketocarbonyls and Vinyl ketones by Chiral Primary Amines, *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 986-997.

吉鹏举 助理研究员

吉鹏举，1999年本科毕业于西北大学化学系；2005年硕士毕业于西北大学化学系有机合成专业；2011年在英国 University of Huddersfield 获得物理有机化学博士学位，2005–2008年在天津大学已有技术开发中心工作；2012–2014年在清华大学化学系程津培院士课题组从事博士后研究；2015开始在清华大学化学系工作任职助理研究员至今。

研究兴趣：有机化合物键能领域，溶剂以及溶剂化效应。

电话：86-10-62786053　　邮箱：jipengju@mail.tsinghua.edu.cn

Selected Publications:

1. Wang, Z.; Wang, F.; Xue, X.-S.*; Ji, P.* Acidity Scale of N-Heterocyclic Carbene Precursors: Can We Predict the Stability of NHC-CO_2 Adducts? *Org. Lett.* **2018**, *20*, 6041.
2. Wang, Z.; Gao, F. X.; Ji, P.*; Cheng, J. -P.* Unexpected Solvation-stabilisation of Ions in a Protic Ionic Liquid: Insights Disclosed by a Bond Energetic Study. *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 3538.
3. Yang, J.-D.[†]; Ji, P.[†]; Xue, X.-S.; Cheng, J.-P.* Recent Advances and Advisable Applications of Bond Energetics in Organic Chemistry. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 8611.
4. Xue, X.-S.[†]; Ji, P.[†]; Zhou, B.; Cheng, J.-P.* The Essential Role of Bond Energetics in C–H Activation/Functionalization. *Chem. Rev.* **2017**, *117*, 8622.

杨金东 助理研究员

杨金东，2009年本科毕业于南开大学；2014在南开大学获博士学位；2014–2017年在南开大学从事博士后研究；2017年来清华大学化学系工作至今。

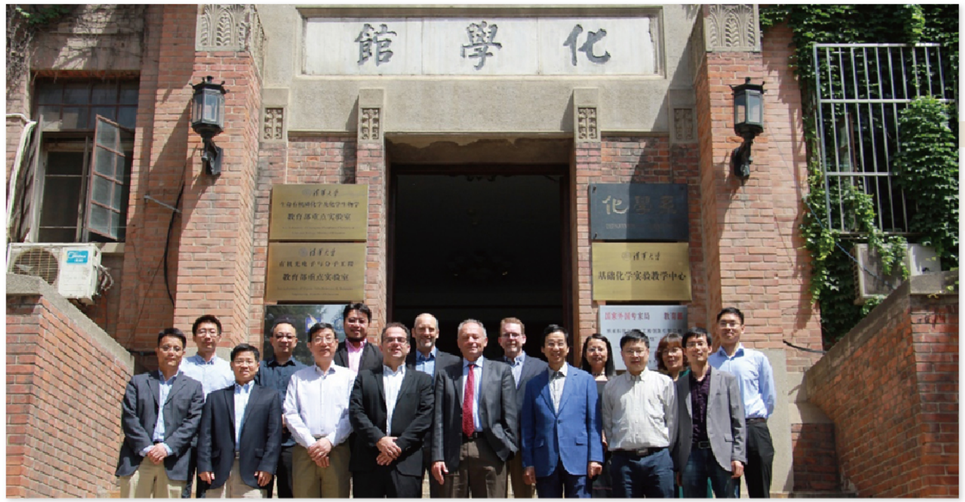
研究兴趣：化学键能量学、键能的应用、反应机理研究。

电话：86-10-62787136　　邮箱：jdyang@mail.tsinghua.edu.cn

Selected Publications:

1. Yang, J.-D.*; Xue, J.; Cheng, J.-P.* Understanding the Role of Thermodynamics in Catalytic Imine Reductions, *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 2913-2926.
2. Zhang, J.; Yang, J.-D.*; Cheng, J.-P.* Nucleophilicity Scale for the Reactivity of Diazaphospholenium Hydrides: Structural Insights and Synthetic Applications, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 5983 –5987.
3. Yang, J.-D.[‡]; Ji, P.[‡]; Xue, X.-S.; Cheng, J.-P.* Recent Advances and Advisable Applications of Bond Energetics in Organic Chemistry, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 8611–8623. (first co-author)
4. Zhang, J.[#]; Yang, J.-D.[#]; Zheng, H.; Xue, X.-S.*; Mayr, H.*; Cheng, J.-P. Exploration of the Synthetic Potential of Electrophilic Trifluoromethyl- thiolating and Difluoromethylthiolating Reagents, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 12690–12695. (first co-author)
5. Yang, J.-D.; Chen, B.-L.; Zhu, X.-Q.* New Insight into the Mechanism of NADH Model Oxidation by Metal Ions in Nonalkaline Media, *J. Phys. Chem. B* **2018**, *122*, 6888–6898.

03 学术交流

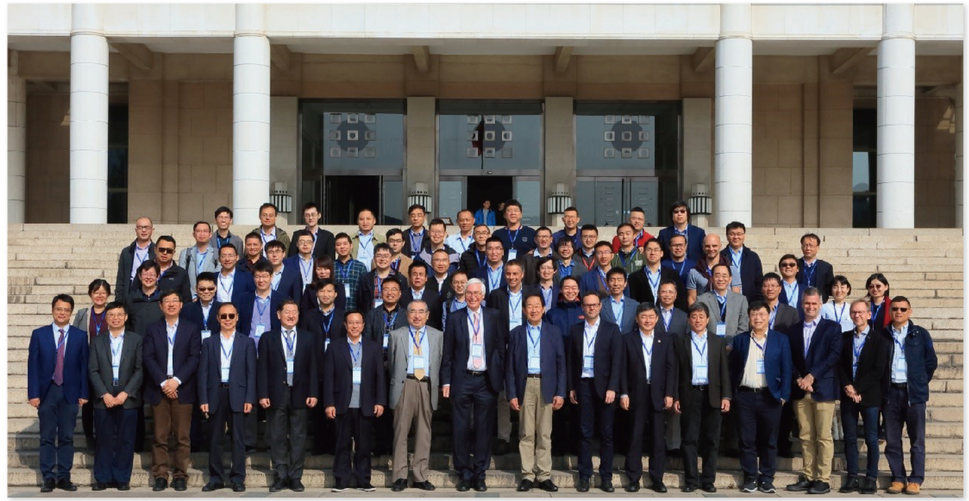


中心自成立以来，积极邀请国内外专家学者来访并开展广泛、深入的学术交流活动。

2018 年 5 月 23 日，中心组织举办了清华大学国际合成化学与催化论坛（International Symposium on Synthetic Chemistry and Catalysis）。本次论坛邀请了 7 位国内外知名学者参会并做学术报告，为参会师生带来了一场学术盛宴。

清華大學 Tsinghua University CBMS

2019 年 10 月 22 日至 10 月 23 日，中心主办了首届国际机理与合成论坛（1st MASS），是这一重要交叉领域国际上的首次会议，旨在为物理有机化学家与合成化学家提供一个思想交流碰撞的平台，共同探索未来有机化学学科发展新模式。大会邀请到了多位国际著名有机化学家，其中包括国内外院士十余人，以及全国几十名优秀青年学者。与会专家围绕物理有机化学及合成化学两大有机化学学科前沿做了精彩的学术报告并于听众展开了热烈讨论，会议取得了圆满成功。



04 科研条件

蒙民伟科技大楼

有机合成实验室

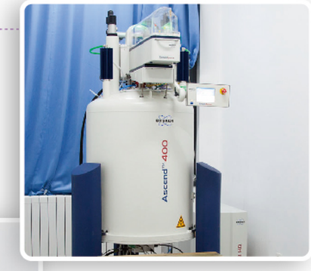
仪器分析实验室

物理有机实验室

中心配置了有机合成实验室，仪器分析实验室，物理有机实验室，化学生物学实验室等，并配有先进的科研仪器设备，可为有机化学相关学科的研究提供一流的技术平台。

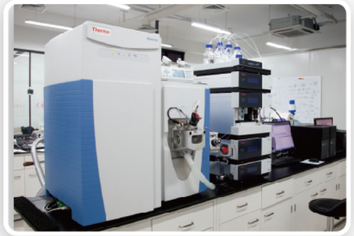
中心测试平台的仪器对校内外开放提供测试服务，欢迎校内外学术和工业界研究人员利用本中心仪器平台的资源开展科学研究工作。中心的仪器平台可提供常规测试服务（如 **NMR**，**HPLC-HRMS**）和研究型测试服务（如 **VP-ITC**，**ReactIR and Laser Photolysis** 等）。

激光闪光光解系统

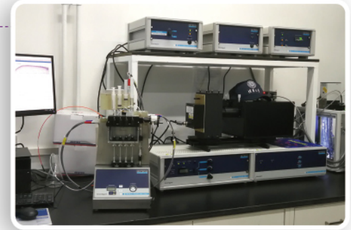


Bruker AVANCE III HD 400 NMR

四通道 Stopped-Flow



Thermo Scientific Q Exactive™



TgK Scientific Cryo Stopped-Flow system

05 教书育人

基础分子科学中心定期举办各类集体活动，包括中心学术年会及中心趣味运动会等。通过学术交流、体育项目等形式，促进师生交流、增进师生友谊，提升学术志趣，增强中心凝聚力。

中心年度趣味运动会

中心学术年会

中心毕业欢送会暨团建活动

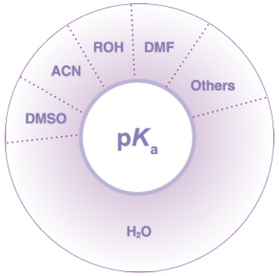
教师节活动

06 *i*BonD键能数据库

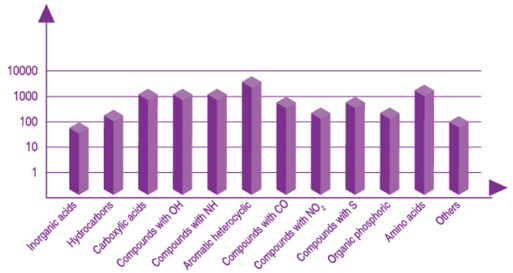
化学键的键能是影响化学反应最核心的参数，也是引领化学的理性发展以及未来化学领域发展人工智能所必需的两大要素：即大数据和算法的重要基础。程津培院士带领团队打破了美国等国外机构在科学大数据的管理和运营上的长期垄断，以创新、担当和攻坚克难精神，化解了国外团队无法解决的专业化甄别海量数据的瓶颈，创建了国际上首个智能型、权威性并且涵盖最齐全的键能数据库 Internet Bond-energy Databank (pK_a and BDE)--*i*BonD，为全球学术界免费提供丰富的键能相关信息。

*i*BonD 键能数据库是全球唯一基于互联网及移动端的智能型化学键能“大数据”平台；涵盖了已被实验测定、可信赖的绝大多数已知键能数据（均裂能 BDE 和异裂能 pK_a）。该数据库能够提供多种便捷的检索模式和专业全面的键能相关信息。*i*BonD 实现了物化基本参数的智能化网络检索，领先于世界上任何一个同类数据源；彰显了我国学界的大国责任担当，进一步夯实了我国键能研究在国际上的领衔地位。

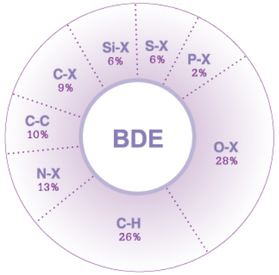
- 自发布以来，*i*BonD 已有 4000 多名注册用户，十万余次访问量，多次被 JACS、Angew、Chem. Rev.、Chem. Soc. Rev. 等权威期刊引用，受到国内外学者的广泛赞誉，如：著名物理有机化学家、德国科学院院士、慕尼黑大学 Herbert Mayr 教授在 Chemistry Views 上以“最有效的查询 pK_a 数据的途径”（The Most Efficient Way to Find pK_a Values）为题撰文，向科学界强烈推荐并高度评价了 *i*BonD 数据库。
- 在后续工作中，我们将继续优化检索引擎、更新已有键能数据，同时还进一步将氧化还原电位、吸附能其他类型等键能参数加入到该数据库中，最终将 *i*BonD 建成涵盖最广、数据最权威的键能大数据共享平台。



30000 个 pK_a 在不同溶剂的分布



20000 个化合物 pK_a 的分布情况



7600 个 BDE 在不同溶剂的分布

5200 个化合物 BDE 的分布情况