

新物质创造学科群 自旋响应催化项目 2025 级博士研究生培养方案

(学制 4 年)

一、培养目标

自旋响应催化研究是一个跨学科的前沿领域，涵盖了催化科学与技术、合成化学、自旋电子学、科学仪器及计算机科学与技术等多个方面。这一研究领域需要化学、物理、光电、材料和计算机等学科的紧密结合，本项目旨在培养学科交叉的高级人才。围绕“催化剂自旋效应的化学本质和调控规律”这一核心科学问题，以电子结构具有代表性的铁系/稀土金属配合物催化剂及其催化的重要有机合成反应为切入点，将催化剂和反应-测量模拟-催化原理三者的研究有机结合，通过充分的学科交叉，建立自旋响应催化新领域，构建自旋响应催化研究新范式。通过本项目实施，培养在自旋响应催化交叉研究领域的专业人才。具体培养目标如下：

1. 思想品德：以立德树人为根本，较好地掌握马克思主义立场观点方法，拥护党的基本路线和方针政策，热爱祖国，遵纪守法，品德良好，学风严谨，积极为社会主义现代化建设事业服务。

2. 业务素质：掌握扎实的基础理论和系统的专门知识和技能，掌握化学、物理、材料科学及计算机科学等相关学科的基础理论与前沿知识，全面了解本学科的现状、发展方向和国际前沿。具有独立从事理论及应用研究的能力，例如系统掌握开壳层催化剂合成与表征、催化反应设计、量子计算与机器学习等关键技术，能通过多尺度模拟（如 DFT、分子动力学）解析自旋催化机制，开发基于机器学习与量子化学计算的跨尺度架构，实现催化剂电子自旋态的精准预测与调控。通过与其他学科交叉，以新角度解决各类实际问题，推动自旋响应催化研究。掌握一门外国语，能顺利地阅读本专业的外文资料和撰写高水平学术论文。

3. 身体素质：具有健康的体魄、良好的心理素质。

二、主要研究方向

1. 自旋响应催化剂和催化反应

发展新型自旋响应铁系/稀土金属配合物催化剂，挖掘配体结构和催化剂自旋态之间的定性和定量关系。将自旋响应铁系/稀土金属催化剂用于氢转移、碳金属化反应、交叉偶联等在有机合成中广泛使用、代表了典型成键方式的反应类型，挖掘自旋响应催化剂不可替代的反应性，拓展成键的方式，提升基础化学品和精细化学品的合成效率，推动基于新结构的功能分子

的发现。

2. 自旋响应催化测量与模拟平台

发展开壳层催化剂的电子自旋测量新方法，包括单分子自旋原位测量器件、NMR、质谱、超快光谱、ESR-STM 联用技术等。发展超快激光技术和透射电镜电影技术，实现物质创制过程的极限时空尺度观测，精确、实时测量化学键的断裂与形成、中间体的生成与转化等关键过程的自旋变化，突破当前反应机制表征的时空尺度。通过学科交叉合作，建立开壳层催化剂高精度快速计算新方法。利用自动化技术建立开壳层催化剂的“结构-光谱-反应性”三位一体实验数据库，将跨尺度计算和人工智能融合，解析数据信息，提取成功催化剂的共性结构特征，结合反应机理，理解共性结构对于关键基元反应的促进机制，以此为基础实现自旋响应催化剂和催化反应定向设计。

3. 自旋响应催化机制与理论

以自旋响应催化反应中新奇实验结果（配体、金属、添加剂、溶剂等造成反应结果显著改变）背后的机制研究为切入点，借助建立的自旋响应催化测量平台，将传统的动力学、热力学、活性中间体分离表征和与人工智能及理论计算技术协同，升级传统机理研究手段，通过电子自旋表征、催化过程观测、数学建模、物理原理解析，深刻揭示开壳层催化剂的电子自旋效应，提升自旋响应催化剂和催化反应的理性设计水平。揭示催化剂自旋态在催化反应中发挥的作用，建立电子自旋效应定性乃至定量描述的方法，建立电子自旋调控催化反应的新理论。借助人工智能等新技术，优化自旋响应催化过程中的关键参数，预测并筛选自旋响应催化新体系。

三、培养方式

本专业将采用双导师制，提供系统的学术训练和研究支持，导师积极参与学位论文的各个重要环节。

1. 课程学习

基础课程：高等有机化学、物理化学、量子化学、金属有机化学、分析化学、量子化学与分子模拟等。专业课程：自旋化学、自旋电子学基础、催化化学、计算化学与分子模拟等。选修课程：高级数据分析与机器学习，人工智能在催化中的应用，配体与催化剂设计、反应动力学与机制研究等。

2. 实验技能培训

实验室实践：自旋响应催化剂的合成与表征，催化反应的开展与优化，使用先进的仪器设备进行测量，如穆斯堡尔谱、电子自旋共振（ESR）、光电子能谱（XPS）、单分子自旋原位测量、超快激光光谱等。

跨学科合作：在导师的指导下，积极参与与其他学科的合作项目，获取材料科学、物理学和计算机科学的实验技能，拓宽研究视野。

3. 研究项目

独立研究课题：在导师的指导下，选择与自旋响应催化剂相关的研究课题，开展独立的科研工作。项目应涵盖催化剂的设计、合成、催化性能测试及反应机理解析，运用机器学习和计算化学技术对实验数据进行分析，建立催化剂性能与结构之间的定量关系。

4. 科研训练

学术交流：定期参加学术会议，积极参与学科交叉的技术探索，在院系和指导教师的科研项目和国内外进行学术交流。

论文写作与发表：学习科研论文的撰写格式与技巧，参与指导老师的论文撰写工作，争取在高水平期刊发表研究成果。

项目管理与团队合作：学习科研项目的管理方法，锻炼团队合作与领导能力。

5. 评估与反馈

定期评估：每学期进行一次研究进展汇报，评估研究生的学习和研究成果。

设置阶段性目标，确保研究生的科研能力逐步提升。

导师反馈：导师定期与研究生沟通，提供指导和反馈，帮助研究生克服研究中遇到的困难。

四、学制及修业年限

本项目学术学位博士研究生学制为4年，最长修业年限为基本修业年限延长2年。

五、课程设置及学分要求

类别	课程编码	课程名称	总学时	学分	授课学期	授课方式	开课单位代码	选课要求
必修课	90011203	中国马克思主义与当代（理科）		2	2	讲授	120	
	90011101	第一外国语（英语）		2	1、2	讲授	100	
	05121024	研究生学术规范与论文写作指导课程	34	2	1	讲授	051	四选一
	03121006	学术规范与论文写作指导	16	1	2	讲授	031	
	02121071	研究生学术规范与学术论文写作指导	17	1	1	讲授	021	

选修课	03521005	学术规范及论文写作指导	16	1	1	讲授	035	
	07811001	自旋响应催化前沿研讨课	36	2	2	讲授、讨论	078	
	05111004	博士生文献报告	51	3	3	讲授、阅读、讨论	051	
	05111006	当代有机化学前沿	51	3	1~5	学术报告	051	
	03111303	科技英语训练	32	2	2	讲授、讨论	031	
	03111003	科研方法与专业实践	64	2	1-4	讲座、实践	031	
	03111401	高等固体电子学	32	2	2	讲授	031	
	03112404	薄膜物理	32	2	2	讲授	031	
	03122504	通信系统	48	3	1	讲授	031	
	03121102	随机过程	48	3	1	讲授	031	
	03121409	高等半导体器件物理	48	3	1	讲授	031	
	03511703	计算机科学专题研究报告	32	2	3	报告、讨论	035	
	03511704	计算机科学前沿讨论班（1）	16	1	1	报告、讨论	035	
	03511705	计算机科学前沿讨论班（2）	16	1	2	报告、讨论	035	
	02121072	实验室安全教育	18	0	1	讲授、实训	021	
	02121074	物理学前沿	51	3	2	讲授	021	
		第二外国语		2	1、2	讲授	100	
		体育	34	0	1、2	讲授		
	90052002	创新思维与创业实验		1	1、2	在线课程	900	
	05122003	生物无机化学	34	2	1	讲授	051	
	05122054	物理有机化学	34	2	1	讲授	051	
	05122006	功能配合物化学	34	2	2	讲授	051	
	05122011	分子磁性	34	2	2	讲授	051	
	05122014	免疫化学分析	34	2	1	讲授	051	
	05122017	现代药物分离方法与技术	34	2	2	讲授	051	
	05122022	绿色化学	34	2	1	讲授	051	
	05122029	聚合物现代光谱技术	34	2	1	讲授	051	
	05122034	群论及其在化学中的应用	34	2	1	讲授	051	
	05122035	分子模拟	34	2	2	讲授	051	
	05122036	计算机在化学中的应用	34	2	1	讲授	051	
	05122038	聚合物胶体	34	2	1	讲授	051	
	05122040	生物医用材料导论	34	2	1	讲授	051	
	05122041	生物化学	34	2	1	讲授	051	
	05122042	高分子吸附分离材料与技术	34	2	1	讲授	051	
	05122045	高分子化学与物理（包括实验）	68	2	1	讲授	051	
	05122046	高分子的分子设计	34	2	2	讲授	051	
	05122047	高分子合金材料	34	2	2	讲授	051	
	05122026	有机立体化学	34	2	1	讲授	051	
	05122057	超分子化学	34	2	1	讲授	051	
	05122058	计算化学	34	2	1	讲授	051	
	05122059	高分子软物质的研究方法	34	2	1	讲授	051	

05122060	高分子化学反应	34	2	1	讲授	051	
05122061	质谱分析方法及应用	34	2	1	讲授	051	
05122064	Advanced Inorganic Chemistry	34	2	2	讲授	051	
05122066	Chemical Kinetics	34	2	1	讲授	051	
05122067	Structural analysis of organic substances	34	2	1	讲授	051	
05121018	现代仪器分析实验	34	2	1	实验	051	
05122072	智能材料	34	2	1	讲授	051	
05122074	天然产物化学	34	2	1	讲授	051	
05122075	手性精细化学品不对称氢化合成	34	2	1	讲授	051	
05131050	农药药理学	34	2	1	讲授	051	
05122078	功能高分子	56	3.5	2	讲授	051	
05122076	纳米生物分析化学	51	3	1	讲授	051	
05122084	AI 化学导论	51	3	1	讲授	051	
03111001	信息科学前沿	32	2	1、2	讲座	031	
03111004	专业英语	16	1	2	讲授	031	
03111402	SoC 系统设计方法学	32	2	2	讲授	031	
03112401	超导器件原理与应用	32	2	2	讲授	031	
03112403	超导微波电路	32	2	2	讲授	031	
03112405	微波与射频电子学	32	2	1	讲授	031	
03112413	数字信号处理（全英文授课）	48	3	1	讲授	031	
03112415	化合物半导体材料与器件	32	2	1	讲授	031	
03112417	现代半导体器件物理	32	2	1	讲授	031	
03122403	应用量子力学	32	2	1	讲授	031	
03112418	模拟大规模集成电路	32	2	1	讲授	031	
03112419	数字大规模集成电路	32	2	1	讲授	031	
03112420	薄膜光电子材料	32	2	1	讲授	031	
03112421	等离子体物理学	32	2	1	讲授	031	
03112422	新型光伏材料与器件	32	2	1	讲授	031	
03112423	薄膜材料表征	32	2	1	讲授	031	
03112409	显示与成像技术	32	2	1	讲授	031	
03121506	机器学习	32	2	1	讲授	031	
03122509	纳米材料科学基础与前沿	32	2	1	讲授	031	
03121505	人工智能入门与实践	32	2	1	讲授	031	
03112307	微纳光学及应用前沿	32	2	2	讲授、讨论	031	
03112316	超快光学及应用前沿	32	2	2	讲授、讨论	031	
03112309	生物光子学前沿	32	2	2	讲授、讨论	031	
03112310	THz 科学与技术前沿	32	2	2	讲授、讨论	031	
03112311	光纤通信与传感技术前沿	32	2	2	讲授、讨论	031	
03112312	光信息技术科学前沿	32	2	2	讲授、讨论	031	
03521006	深度学习	32	2	2	讲授	035	

	03522717	网络与系统安全	32	2	1	讲授	035	
	03522730	图算法及其应用（隔年开）	32	2	2	讲授	035	
	03512713	信息科学中的数学方法	32	2	1	讲授	035	
	03522713	移动计算与无线网络	32	2	2	讲授	035	
	02122082	科学简史与科研方法论	34	2	2	讲授	021	
	02122054	固体物理讲座	34	2	1	讲授	021	
	02122021	计算物理	51	3	1	讲授	021	
	02122026	理论物理专题讲座	51	3	2	讲授	021	
	02122039	铁电体物理	51	3	1	讲授	021	
	02121008	高等统计物理	51	3	2	讲授	021	
补修课				不计学分				
毕业学分要求								
总学分	校公共必修课		专业必修课		专业选修课		其他学分	
20	4		10		6		0	

六、培养环节

1. 资格考试（必修）

资格考试是博士研究生（含直博生）培养的必修环节。资格考试可以笔试、答辩、实验操作等多种形式组织开展。学术学位研究生着重本学科专业应掌握的基础理论知识、专业知识、学科前沿等知识考察。

博士研究生资格考试由导师组织考核小组对学生的政治、思想品德、学位课程、论文进展情况和对国内外本研究方向最新研究动态和参考文献掌握情况进行全面考核，并给出考核意见。

2. 开题报告（必修）

博士研究生一般应于第3学期完成开题报告，开题报告由各项目组以现场汇报的方式组织开展，汇报人须提前提交纸质开题报告。开题报告内容包括论文选题依据、研究内容及目标、研究方案及可行性分析、研究工作计划、研究特色与创新之处等。

开题报告汇报会，研究生须向评审组作开题汇报，并回答专家提问；评审组听取开题报告并审核相关材料，根据《开题报告评价表》进行评价，提出明确的修改意见，并给出考核结论。

研究生根据评审意见对开题报告进行修改，经导师审核后提交所在培养单位。开题报告定稿后，由所在培养单位保存，待研究生毕业或授予学位后，存入培养档案。考核结果为“不合

格”者，须重新进行开题，通过后方能进入中期考核环节。

3. 中期考核（必修）

博士研究生通过开题报告至少 6 个月方可申请中期考核，一般应于第 5 学期前完成。各项目组组织成立中期考核专家组（考核组），对研究生进行现场答辩考核，考核组由 3 人以上组成，成员应为相关领域的博士研究生指导教师或具有正高职称的专家，鼓励聘请校外专家，专业学位研究生中期考核须有至少一位行业专家参加；研究生指导教师可参加中期考核组，但不参与表决。

中期考核答辩会，研究生须向考核组作中期汇报（博士生不少于 15 分钟），并回答专家提问；考核组听取中期汇报并审核相关材料，根据《中期考核评价表》进行评价，提出明确的修改意见，并给出考核结论。

考核组结合研究进展、研究生日常科研表现，综合考察学生的科学研究能力，依据《中期考核评价表》评分，不以学生是否获得科研成果（如论文、专利等）作为其是否通过中期考核的充分必要条件。

中期考核不通过者，须在至少 2 个月以后申请再次中期考核，一年内未提出再次中期考核申请者按照两次中期考核不合格处理。两次中期考核不通过者，应由导师组给出意见并按相应流程退出专项培养或予以延期毕业；其他培养环节规定按学校相关文件执行。博士生通过中期考核后至少 6 个月方可申请毕业答辩。

七、毕业标准及申请学位成果要求

1. 毕业标准

毕业标准参照南发字〔2024〕72 号《南开大学研究生学则》文件。

2. 申请学位成果要求

申请学位的成果要求按照南发字〔2023〕171 号《南开大学博士研究生申请学位成果要求指导意见》执行。项目组将结合涉及学科的博士研究生申请学位成果细则及目录，综合项目研究任务和培养目标，确定项目制博士生申请学位成果要求，经学科群学位评定委员会审核，报研究生院审核备案后实施。

八、学位论文

1. 论文基本要求

博士研究生的学位论文应结合科研任务，选择对社会主义现代化建设或学科发展具有重要

理论意义或应用价值的课题，具有明显的创新性和先进性。对所研究的课题应有所见解。学位论文工作时间原则上不少于 3 年，论文要求语言准确、精炼、逻辑清晰，图文并茂，数据齐全，字数不少于 5 万。撰写论文的具体要求见《南开大学研究生学位论文写作规范（2025 版）》。

2. 论文评阅

论文评阅参照《南开大学博士学位论文及实践成果评审工作实施办法》（南研字〔2025〕1 号）执行。评阅专家将根据博士论文涉及学科的评审专家组成。

3. 论文答辩

论文答辩参照《南开大学研究生答辩工作管理规定》（南研字〔2025〕3 号），答辩委员将邀请博士论文涉及学科的知名专家组成。