

西华大学硕士研究生导师简介

姓名	曾义		
性别	女		
出生年月	1979.04		
职称/最高学历	博士		
e-mail	zengy@mail.xhu.edu.cn		
电话	13880704547		
招收专业	功能材料化学		
主要研究方向	理论化学，药物分子设计		
个人简介:			
<p>2009年7月四川大学物理化学专业获得理学博士学位，并于当年进入西华大学工作。中国化学会会员，已受邀成为国家自然科学基金项目评审专家，入选国家科技专家库。现为校级有机功能物质绿色制备技术重点实验室理论研究方向学术带头人。近年以第一作者身份发表SCI收录论文11篇，作为负责人主持了国家自然科学基金、教育部春晖计划和四川省教育厅重大培育项目各1项，并且结题完成了四川省教育厅青年基金和西华大学重点项目各1项。2015年7月，被评为西华大学优秀科技工作者。</p> <p>现主要从事有机化学反应过程机理的理论研究和催化剂的设计合成研究，以及药物分子的构型构象理论研究和设计合成研究。</p>			
近年作为项目负责人主持的科研项目:			
序号	科研项目名称	项目来源	项目起止时间
1	一种芳构化驱动的全新仿生烷基转移反应的理论研究	国家自然科学基金项目	2015.01—2017.12
2	新型抗微生物多肽的设计、合成和活性研究	教育部春晖计划	2014.07—2016.07
3	新型转酰胺反应构建药物分子酰胺键的反应机制及超分子催化剂的设计合成研究	四川省教育厅重大培育项目	2015.01—2017.12
4	嘌呤类抗HIV不饱和核苷类衍生物的理论研究	四川省教育厅青年基金项目	2011.01—2013.12
科研成果鉴定及奖励:			

西华大学硕士研究生导师简介

近年发表的科研论文:

以第一作者身份, 西华大学为第一单位发表的 SCI 收录论文 11 篇

序号	论文题目	期刊名称	发表期数	期刊级别	影响因子
1	Nickelacyclopentadienylchromium tricarbonyl unit as a bulky pseudohalogen in cyclopentadienylchromium complexes leading to low-energy high-spin structures	Inorganic Chemistry 2 区	2015,54(11), 5309-5315	SCI 收录号: CJ6XI	4.762
2	Tuning Effects for Some Cyclic Aromatic Carbenes Bearing Remote Amino Groups	Journal of Organic Chemistry 2 区	2014,79(7), 2926-2933	SCI 收录号: AO5UD	4.721
3	Metallocene versus Metallabenzene Isomers of Nickel, Palladium, and Platinum	Organometallics 2 区	2014, 33(24), 7193-7198	SCI 收录号: AE5GT	4.126
4	Dinickelametalloenes: Sandwich Compounds of the First-Row Transition Metals (M = Fe, Co, Ni) with Two Pentahapto Planar Nickelacycle Ligands	Organometallics 2 区	2014,33(17), 4410-4416	SCI 收录号: AX8CJ	4.126
5	Metallametalloenes: Sandwich Compounds of the First-Row Transition Metals (M, M = Fe, Co, Ni) Containing a Metallacyclopentadiene Ring	European Journal of Inorganic Chemistry	2013, 12, 2070-2077	SCI 收录号: 127CA	2.942
6	A binuclear trimethylenemethane cobalt carbonyl providing the first example of a low-energy perpendicular structure with acyclic hydrocarbon ligands	New Journal of Chemistry	2014,38(9), 4275-4281	SCI 收录号: AOIIM	3.086
7	Some "remarkably stable" chalcogen(II) dications, including comparisons with their structurally distinct monocations and neutrals	New Journal of Chemistry	2012, 36(10), 2000-2006	SCI 收录号: 006NG	3.086
8	The Rigidity of the Central C ₄ Fe ₂ Unit in Binuclear Ferrole Iron Carbonyl Derivatives upon Decarbonylation.	Polyhedron	2014, 78, 123-129	SCI 收录号: AJ7NQ	2.011
9	Substituent Effect on the Acid-Promoted Hydrolysis of 2-Aryloxazolin-5-one: Normal vs Reverse	J. Phys. Chem. A	2011,115,4995-5004	SCI 收录号: 761UU	2.693
10	Open Chains versus Closed Rings: Comparison of Binuclear Butadiene Iron Carbonyls with their Cyclobutadiene Analogues	New Journal of Chemistry	2011,35,920-929	SCI 收录号: 741ZQ	3.086
11	Highly Unsaturated Binuclear Butadiene Iron Carbonyls: Quintet Spin States, Perpendicular Structures, Agostic Hydrogen Atoms, and Iron-iron Multiple Bonds	Int. J. Mol. Sci.	2011,12(4),2216-2231	SCI 收录号: 746II	2.862