2008 附件 1

2018 年中国科学院大学
李佩教师奉献奖候选人推荐表

候 选 人 姓 名　　计明娟

主　讲　课　程　　理论与计算化学

　　计算化学实验

院系名称（盖章）　　化学科学学院

填　表　时　间　　2018 年 9 月 23 日

教务部制

填表说明

1. 本表用钢笔填写或打印，要求字迹清楚、端正，内容翔实、准确。
2. 申请人所填内容，由所在院系负责审核。
3. 所填论文或专著须已在正式刊物上刊出或正式出版。
4. 教学手段是指多媒体课件、幻灯、投影等，应用情况是指使用频率及熟练程度。
5. 如表格篇幅不够，可另附纸。

一、基本情况

院（系）：化学科学学院

姓名	计明娟			出生年月	19491217	性别	女
政治面貌	党员			民族	汉		
身份证件类型	□ 居民身份证 □ 香港特区护照/身份证明 □ 澳门特区护照/身份证明 □ 台湾居民来往大陆通行证 □ 护照						
身份证件号码	1 1 0 1 0 8 1 9 4 9 1 2 1 7 2 2 6 0 b						
最后学历（学位）	本科	授予单位		北京大学	授予时间	1978.2	
参加工作时间	1969 年 5 月			从事高等教育教学工作年限	40 年		
专业技术职务	教授			行政职务			
固定电话	69672522			移动电话	18610990706		
传真				电子信箱	jmj@ucas.ac.cn		
联系地址、邮编	地址：北京市玉泉路 19 号甲，邮编：100049						
何时何地 受何奖励	2008 年 获宝钢教育基金会“宝钢优秀教师奖”。 2008 年 获研究生院“杰出贡献教师”荣誉称号。 2005、1996、1991 分别获研究生院校级优秀、优良课程奖。 2009、2010、2011、2012 分别被评为校级优秀个人。						
学生评价情况	摘自学生课程评估：老师备课充分，讲解条理清晰，重点突出，深入浅出，善于通过通俗易懂的事物帮助学生理解较难的内容，课后耐心解答学生问题；授课中语言生动，富于启发性，幽默诙谐，深得我们喜欢。课程理论与实验相结合，因材施教，学以致用，能调动学生学习积极性，达到教学目的和要求，受益非浅。每年评估结果：优。						

主要学习、工作经历		
起止时间	学习/工作单位	所学专业/所从事学科领域和担任的行政职务
1974.9-1978.1	北京大学化学系（学生）	物理化学专业、任系学生会主席
1978.2—至今	科学院研究生院化学学院（任助教、讲师、副教授和教授）	从事计算化学、药物化学领域教学和科研工作。曾任党支部书记和党总支委员
2008.7-2008.9	美国德克萨斯大学药学系	做访问学者

二、师德表现情况

师德师风表现简况

从教 40 年，始终坚持一个信念：忠诚并献身于党的教育事业。作为一名人民教师，我清楚地认识到教书育人，为人师表是自己的职责。遵照“四有”好老师和”四个引路人”标准，平时能严以律己，言传身教，工作敬业，踏实勤勉，求真务实，勇于探索，学风严谨，具有良好的职业道德和较强的团队精神及服务意识。工作中，不仅能很好地完成教学和科研任务，而且积极参与教学改革和注重研究生能力的培养。

在 30 多年的教书育人生涯中，我自觉养成了谦虚谨慎、为人师表的做人原则和严于律己、一丝不苟的做事方式。平时对人正直、坦率，相互尊重，乐于助人，在老师和学生中有很强的亲和力。对待教学工作，我认为永远没有最好，只有更好。所以，我总是勉励自己更上一层楼，不断提高自己的科学和研究水平。只有自己不断在科学前缘研究和努力，才能不断把握学科发展趋势、更新和丰富教学内容，提高教学质量。才能适应科学发展的大潮流和新世纪人才培养的需要。我通过申请主持多项科研任务，在完成科研任务中提高了自己的科学水平，从而在《理论和计算化学》十余年的讲授中，不断更新教学内容（达 50%），并基于自己的科研经验，开设了《计算化学实验》的新课程。

一直以来，我对研究生的培养按照德才兼备原则，始终教育他们要学会先做人，后做事。即，首先希望学生有理想、有抱负，有投身于科学事业的献身精神。并不断从思想上磨练自己，逐渐把自己培养成一个正直、有责任感、做事讲原则，做人讲诚信的优秀人才；同时，要求学生在科学研究中勇于探索未知领域，培养自己的创新能力和多角度的思维方式，并要求学生养成脚踏实地，严谨求实，经得起失败和挫折考验，从而提高发现问题和总结规律的能力，自觉培养成为一个思想活跃、大胆创新、德才兼备的高素质人材。

我言传身教，把自己多年积累的教学经验、课件、资料、授课 PPT 、试题库等分享给年轻教师，希望他们早日成为栋梁。作为学校的教育委员会委员和督导组成员，认真督导听课，并给年轻教员提出中肯的建议。

所获相关荣誉

序号	荣誉名称	颁奖部门及时间	署名次序
1	**宝钢优秀教师奖**	**宝钢教育基金会，2008 年**	1
2	**《高等化学实验–红外与紫外光谱》校级优秀课程奖**	**研究生院　　1991 年**	集体奖
3	**《生物分子结构化学》校级优秀课程奖**	**研究生院　　1996 年**	1
4	**《生物分子结构化学》校级优良课程奖**	**研究生院　　2005 年**	1
5	**校级优秀个人。**	**研究生院　　2009-2012 年**	1
6			

三、教学工作情况

1. 主讲本科课程情况（近三学年）

课程名称	起止时间	本人本校实际课堂教学学时	授课班级	总人数

选用教材或主要参考书目情况			
名称	作者	出版社	出版时间

2. 主讲研究生课程情况（近三学年）

课程名称	起止时间	本人本校实际课堂教学学时	授课班级	总人数
理论与计算化学	2015—2016 学年(春)第二学期	50	全校	59
理论与计算化学	2016—2017 学年(春)第二学期	50	全校	83
计算化学实验	2016—2017 学年(春)第二学期	32	全校	69
理论与计算化学	2017—2018 学年(春)第二学期	50	全校	86
计算化学实验	2017—2018 学年(春)第二学期	32	全校	66

3. 其它教学环节

（含指导本科生实习、课程设计、毕业论文、毕业设计以及指导研究生等）

曾培养硕博连读生 4 名，博士生 2 名，硕士生 5 名；

现协助崔巍副教授指导硕士研究生 3 名。

自 2008 年以来，一直担任学校教育委员会委员和督导组成员。主要任务就是每学期督导各系上报的督导课程。为此投入了大量的时间和精力，基本每年要督导 20 余门课程，听课后还要讨论和给出评价意见，并撰写成文提交教务处。有时还要与授课教师当面交换意见，及时纠正问题，提高教学质量。

此外，参加化学实验室的筹建和计算化学二级学科设置的建设。

4.教学手段开发、应用情况

教学手段主要是采用多媒体工具。十不仅自己频繁而熟练使用，学生使用更频繁，因课件、PPT 及辅助资料都是上传到教学网站，学生可随时下载进行预习、复习和讨论。由于本课程的教学内容很多地方要通过展示图文表达，甚至很多需要动态画面（比如动力学的运动轨迹、受体和配体的结合位点观察等等）。而原参考书中的图片都是静态的，不能很好的反映内在的信息，因此我们就利用自己科研的实例模建复合物，展示动态轨迹和展示结合位点等等。利用开发的手段，沿用至今，得到学生的赞赏，且引起学生对此课程的兴趣。

虽然现在教学以多媒体为主，但是一些公式推导教学，板书更有利于学生理清科学思路，理解和接受教授内容，所以我在必要的情况下，仍然坚持某些内容清楚的板书表达。也得到了学生的好评。

5. 教学内容更新和教学方法改革情况

近几来，主要承担两门课程，即:《理论与计算化学》(原名为《分子模拟原理和应用》)和《计算化学实验课》。

《理论与计算化学》是一门以近现代理论化学的各种理论方法为基础，结合现代计算机技术的一门课程，其特点：基础宽，数学多、实用性强，是一门理论联系实际的课程。由于它涉及化学、生物、物理、数学及计算机各个学科，选课的学生不仅涵盖化学各专业的学生，还包括数学、物理、生物等系的学生，因此基础不同，背景不同，需求更不同，这就要求自己掌握和了解更多的研究方向和补充新的运用例子，从而满足更多学生的需求。经过几年的实践，为了因材施教，统筹兼顾，首先把课程内容进行了调整，把重点放在基本概念和物理模型的理解上，然后增添书中没有的新方法和新例子。其次，将教学的时间分配做了相应调整，把上机训练从20学时调整至32学时，同时在方式上也进行了改进，把本来都是个人独立完成的上机训练题目，调整一部分为集体合作完成，最后用PPT的形式在课堂上进行交流和提问，这样不仅培养学生的合作精神，也营造了课堂互动和教学相长的氛围，深受学生喜爱。

《计算化学实验课》是根据学生的强烈要求，近两年增设的。仅仅理论课讲授满足不了大家上机实践的需求，更满足不了学生掌握科研一线专用软件的训练和应用。通过实验课学生得以实践并与教师互动，结合实验中的问题向教师提问和交流，增强了对理论的理解和实际解决问题的能力，为回所后开展科学研究打下了很好的基础。实验课的内容也跟着前沿领域的发展而不断更新。

为了提高学生学习知识的能力，我不仅在课堂中传授知识，也要求学生走出教室，利用各种途径获取新知识。十多年来，我一直要求学生查阅一篇与课程相关的外文文献，尽量推荐他们查阅新的和获诺贝尔奖的文献，通过对这些原创性工作的学习和总结，能提高学生的视野并启发创新的灵感。,

6. 承担重要教学改革项目情况

项目名称	项目来源	经费（万元）	主持/参加	起止日期

7. 主要教学改革与研究论文、专著及自编、主编教材情况

论文题目、专著名称/教材名称	期刊名称、卷次/出版社	时间

8.教学获奖、成果推广应用及同行评价情况

（教学获奖的须附获奖证书复印件，并加盖单位公章，注明本人排名及时间、推广应用范围。）

2008 年获宝钢优秀教师奖

2005、1996、1991 分别获研究生院校级优秀、优良课程奖

9.近期教学改革设想

中国科学院的研究生课程必须适应科学发展的大潮流和新世纪人才培养的需要。我近十几年开设的《理论和计算化学》及近几年增设的《计算化学实验》就是按照这个思路进行教学的。教学受到了学生的欢迎，特别是毕业工作的学生反映工作中很受益。

根据目前教学的要求和学生、导师的希望，首先要及时把国际国内最新科研成果反映到教材里来，继续不断更新教材内容。二是遵循华罗庚先生治学“从薄到后、从厚到薄”的思想，将课程理论阐述有效地精炼化，既不失理论基础的背景和依据的讲解，更突出前沿和应用领域的扩展，培养学生不仅掌握坚实的理论基础，更具有活跃的思维能力和开拓的精神。三是将适当增加实验课的内容和学时，训练学生掌握科研一线的专用软件，使学生回所后结合自己的研究工作学以致用，并能发挥积极主观能动性和解决实际问题的能力。四是教学手段和方式要与时俱进，特别把自己的研究成果用最新多媒体手段生动表达，以利于学生理解掌握。

10. 教学梯队建设情况

自 1978 年进入研究生院，先后开设四门研究生课程，具体为《红外与紫外光谱实验》、《生物分子结构化学》、《理论与计算化学》(原名《分子模拟原理和应用》) 和《计算化学实验》。

前两门课程曾经被评为学校优秀课程，为了培养年轻教师早日走上教学第一线，真正起到承上启下的作用，我将自己开设多年并被评为优秀课程的《生物分子结构化学》转交给了留校青年教师崔巍副教授。为了能尽快让其上讲台，我把自己呕心沥血、精心积累多年的讲稿、PPT、试卷和参考资料毫无保留地奉献给了他；同时也常常和他一起商讨、交流教学规律和经验，真正树立一切为学生服务，一切对学生负责的精神。经过几年的努力奋斗和刻苦专研，崔巍老师的教学效果得到学生和老师们好评，也得到校督导组老师们的一致认可和赞扬。

后两门课是近年来随着计算机高性能计算技术的发展和它在计算化学领域的广泛深入应用而开设的课程，《计算化学》被认为是新兴的、多学科交叉的边缘学科，而《计算化学实验》是《理论与计算化学》教学中根据学生强烈要求近两年新开设的课程。作为返聘教师，我为了将来有人顺利接替课程，现也已经让崔巍副教授辅助部分实验课程，并准备不久后让他参加部分理论课的讲授。为将来教学接替和做好教学梯队建设做好充分准备。

四、科研工作情况

科研简况	主持国家自然科学基金面上和重点子课题项目五项，主持科技部专项子课题一项，主持中国科学院战略性先导科技专项子课题一项等，基金总额达 350 余万元。发表第一和通讯作者共发表第一和通讯作者 SCI 论文 30 余篇。 **主要研究成果：** 近年来，我们利用计算机辅助药物分子设计方法，即：同源模建、分子对接、定量构效关系、分子动力学模拟、自由能计算、能量分解和数据库搜索等方法，重点开展了以下两方面研究工作： 一基于 PTP1B 靶酶结构的抗糖尿病药物分子设计 实验证实 PTP1B（酪氨酸蛋白磷酸脂酶）与糖尿病的发生有重要关系，因此，PTP1B 的抑制剂有望成为治疗糖尿病的药物。我们利用 SYBYL6.3 软件相应模块和 AMBER 力场，对两类酪氨酸蛋白磷酸脂酶 PTP1B 抑制剂在活性位点、别构位点以及选择性等方面进行了细致的研究。通过小分子和中草药数据库搜索获取命中分子，经合成、测活，最终命中了两个较高活性和两个较低活性的抗糖尿病的候选先导化合物。 二、基于 G3BP 靶蛋白结构的抗肿瘤多肽纳米药物设计 该研究主要针对现有抗癌药物毒性强、选择性差的缺陷，开展了以 G3BP 为靶点，基于 G3BPs 与 Ras-GAP 蛋白–蛋白相互作用的抗肿瘤多肽纳米药物分子设计。我们运用计算机辅助药物设计和多种分子模拟方法（如蛋白–蛋白对接、虚拟突变、分子动力学、自由能计算以及自由能分解等方法），结合化学及药理学实验技术（如固相多肽合成、MTT 检测等），首先找到了一条原创性 16 肽序列和一条 26 肽序列，经检测，这两条多肽对 HeLa 细胞有较强的抑制作用，和对顺铂有增敏作用。在此基础上，我们又通过重复“设计-合成-测活”这一过程，对原型抗肿瘤多肽进行优化设计和细胞水平的活性、毒性、及其对肿瘤细胞选择性的测定。最终，我们获得了两条高活性、低毒副作用、拥有自主知识产权的新型抗 HCT116（结肠癌细胞株）的 26 肽候选先导化合物。为了解决多肽药物的水解稳定性及生物屏障问题，我们进一步开展了纳米载药体系研究，设计合成得到了不同氨基与羧基比例的 pH 敏感的生物多糖载体分子，通过体外释药性能研究，证实该多糖纳米粒子对多肽具有极佳的保护性能，即在偏酸性环境（pH 5.0）能释放药物，在 pH7.4 时不释放，克服了多肽在体内易水解问题。
汇总	出版专著（译著等）部。
	获奖成果共项；其中：国家级项，省部级项。
	目前承担项目共　1　项；其中：国家级项目项，省部级项目　1　项。

最有代表性的成果	序号	成果（项目、论文、专著）名称	发表刊物，出版单位，时间（获奖的注明奖项名称、等级和颁奖单位）			署名次序
	1	Size-dependent impact of CNTs on dynamic properties of calmodulin	Gao J, Wang L-M, Kang S-G, Zhao L, **Ji M-J**,et al. *NanoScale*. 2014, *6*, 12828-12837 (纳米科学一区期刊)			通讯作者
	2	Unraveling the Allosteric Inhibition Mechanism of PTP1B by Free Energy Calculation Based on Umbrella Sampling.	Cui W, Cheng Y-H, Geng L-L, Liang D-S, Hou T-J, **Ji M-J.** *J. Chem. Info. Model*, **2013**, *53*, 1157-1167. (计算机跨学科应用一区期刊)			通讯作者
	3	Structure-Based Design of Peptides against G3BP with Cytotoxicity onTumor Cells	Cui W, Wei Z, Chen Q, Cheng Y, Geng L, Zhang J, Chen J, Hou T, **Ji M-J**.*J. Chem. Info. Model*, **2010**, *50*, 380-387.（封面文章）(计算机跨学科应用一区期刊)			通讯作者
目前承担的主要项目	序号	项目名称	项目来源	起讫时间	科研经费	本人承担工作
	1	多肽纳米药物的生物学研究	科学院先导专项	2013-2018	123 万	主持
	2					
	3					

五、推荐、评审意见

院系对候选人课堂教学效果的评价意见	计明娟老师任教三十五年以来，工作敬业，求真务实，勇于探索，学风严谨，为人师表，具有良好的职业道德和较强的团队精神及服务意识。开设多门研究生课程，取得了优异的教学成果，得到学生好评。课程多次被学校评为优秀、优良课程。2008 年被评为宝钢优秀教师奖。她还积极培养青年教师，参与学校教育委员会和督导组的工作。 特此推荐。 负责人（签字） （公章） 2018 年 9 月 23 日
学校评审委员会意见	 主任（签字） XXXX 年月日