****

**本科生毕业论文（设计）**

**中期考核登记表**

**论文题目 实时密度泛函方法**

**计算手性分子的电子圆二色谱**

**学生姓名 杨阳 学号 2017K8009915047**

**指导教师 孟胜 职称 研究员**

**导师单位 中国科学院物理研究所**

**学位类别 工学学士**

**专 业 材料科学与工程**

**学院（系） 材料科学与光电技术学院**

**填表日期 2021年4月3日**

**中国科学院大学**

**填 表 说 明**

1. 本表内容须真实、完整、准确。
2. “学位类别”名称：填写理学学士、工学学士等。
3. “专业”名称：填写专业全称。
4. “课题类型”：选填论文、设计。
5. “课题性质”：选填基础研究、应用研究、综合研究及其它。
6. “课题来源”从下列项目中选填：

□ 973、863项目 □ 国家社科规划、基金项目

□ 教育部人文、社会科学研究项目 □ 国家自然科学基金项目

□ 中央、国家各部门项目 □ 省（自治区、直辖市）项目

□ 国际合作研究项目 □ 与港、澳、台合作研究项目

□ 企、事业单位委托项目 □ 外资项目

□ 学校自选项目 □ 国防项目

□ 非立项 □ 其他

1. 该表填写完毕后，须请指导教师审核，并签署意见。

**毕业论文（设计）中期考核报告**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 题目 | 实时密度泛函方法计算手性分子的电子圆二色谱 | | |
| 课题类型 | 论文 | 课题性质 | 综合研究 |
| 课题来源 | 非立项 | | |
| **中期报告摘要：**  本课题旨在使用课题组自主发展的基于Quantum Espresso程序、使用实时密度泛函方法（RT-TDDFT）、基于平面波基组的TDPW程序，利用分子在光激发过程中电子的磁偶极矩和转动响应张量间的关系，计算两种氨基酸分子（丙氨酸和苯丙氨酸）以及一种手性药物分子（沙利度胺）的电子圆二色谱，测试程序计算不同复杂度体系的普适性，同时验证理论方法的可靠性和先进性，为更前沿的手性体系研究打下基础。  目前，本课题进展大体顺利，在导师和课题组师兄的指导和帮助下，按照开题时设计的研究思路一步步开展，完成了目标手性分子的构象搜索和筛选，在此基础上对各构象进行了几何结构优化，得到了各构象零点能校正的总能和相应的Boltzmann构象分布，通过激发态分子动力学计算得到了各构象初步的电子圆二色谱相关数据。  后续的主要工作是处理获得的电子圆二色谱相关数据，将数据图像化，与文献中的实验/计算结果对比后再考虑可能的计算参数修正和数据处理上的调整，以取得与实验符合较好的计算结果或解释计算与其它计算/实验之间差别的来源。  总体而言，本课题能够得到有意义的结果，并能按时提交论文终稿，参与答辩。 | | | |
| **个人小结：**  本学位论文进展大体顺利。使用Spartan 14和VASP程序对三种手性分子进行构象搜索和筛选的结果显示，三种手性分子在室温下的稳定构象数目很少，其中丙氨酸和苯丙氨酸分别有两个主要构象，而沙利度胺只有一种构象主体。这意味着构象Boltzmaan分布效应对最终得到的ECD谱影响有限，但即使只有两种主体构象，加权平均后得到的ECD谱也可能与两种主体构象各自的ECD谱差距较大，所以在得到最终的结果前还不宜妄下结论。三种手性分子结构复杂度的差异很好地反映在了几何结构优化的计算过程和激发态分子动力学的计算过程中。三个分子的体系中都包含C、H、O、N 4类原子，总原子数分别为13、23和29，在截断能等参数设置以及计算资源配置大体一致的情况下，三者在相同初始外加电场下进行相同步数的分子动力学计算所用的时间大致为10:17:43，计算成本的提高随着体系复杂度的提高而剧烈增加，但与同类ECD谱计算方法（如线响应含时密度泛函方法）相比，实际的计算效率是更为理想的。  由于程序没有提供针对材料特定性质计算的数据后处理工具，要得到最终能够直接绘图表达的ECD谱数据，还需要编写程序来实现理论方法中的推导过程，即忽略电子自旋角动量的情况下由输出数据中电子各时刻下的角动量导出电子各时刻下的磁偶极矩，再经过从时间空间到频率空间的逆傅立叶变换得到不同入射光能量下的转动强度，进而得到ECD谱。在此因素的影响下，较多的时间被分配在程序的编写和测试上。不过近期已接近完成这部分的工作，很快可以进一步分析已计算得到的数据，并和文献中的实验/计算结果对比分析。时间允许的情况下（所有工作在4月15日前能够完成），将按照开题计划完成不同泛函配置对结果影响的测试；时间短缺的情况下（所有工作在4月15日前无法完成）则终止泛函的测试，只分析讨论已有的结果。计划在4月23日前完成论文初稿的撰写，在5月之前完成论文的修改，送审论文终稿，按期答辩。 | | | | |
| **指导教师意见（工作量是否饱满、进度安排是否合理，是否能按期完成毕业论文）：**  指导教师签名：  年 月 日 | | | | |
| **学院（系）意见：**    审查结果： □ 合格 □ 不合格  学院（系）负责人签名：  年 月 日 | | | | |