**附件2 报告摘要和简历模板**



**个人简要介绍：杨阳，**

中国科学院大学材料科学与工程专业本科生

曾获“三好学生”称号

曾获二等、三等学业奖学金

曾获本专业科研实践“先进个人”

爱好篮球、书法

**实时密度泛函方法计算手性分子的电子圆二色谱**

**Calculation of the electronic circular dichroism spectra for chiral molecules using Real-Time Time-Dependent Density Functional Theory implementation**

**报告人：杨阳**

**指导教师：孟胜**

中国科学院大学，北京市石景山区玉泉路19号（甲），100043

中国科学院物理研究所，北京市海淀区中关村南三街8号，100190

Email：yangyang171@mails.ucas.ac.cn

**摘要**

手性，即本体无法与其镜像重合的性质，在诸多学科领域具有重要意义。分子手性构型的确定是分子手性研究中基础而具有挑战性的重要课题。手性构型的实验表征方法主要有单晶X射线衍射法、基于手性试剂的核磁共振法和光谱法。相较于前两者，光谱法原理简单，使用范围广泛，对样品要求低，其中的电子圆二色谱法测定简便，分析直观，对分子构型乃至构象特征极为敏感，在分子手性构型分析领域得到了广泛的应用。近年来，随着计算能力的快速提升，量子力学理论计算方法被应用在了手性研究中。从第一性原理出发计算出的电子圆二色谱为实验提供了良好的参照。在时域直接求解含时Kohn-Sham方程的实时密度泛函方法可以给出电子波函数在初始微扰后的实时演化和线性响应，是一种具有良好发展前景的电子圆二色谱计算方法。本论文使用实时密度泛函方法计算了L-丙氨酸、L-苯丙氨酸和R-沙利度胺的电子圆二色谱，计算结果和实验结果吻合，计算速度理想，证明了理论计算方法的可靠性和高效性。