附件2

前置培养方案

学 科：化学

1. 研究方向

（方便有意愿选报导师的学生，提前了解导师研究方向，结合自身兴趣，选报合适的研究课题）

董昊课题组的研究主要是发展多尺度理论计算方法，并结合机器学习，针对复杂体系开展系统研究。研究方向包括如下四个方面：

（1）多尺度模拟理论方法的发展：对微观尺度原子分子的电子结构、复杂化学体系、以及“米量级”宏观现象等多尺度科学问题的高效、准确计算是当前研究的重大挑战。针对上述难题，我们发展了一系列理论计算方法，包括大分子构象增强采样方法DA2/teDA2、极化力场方法、疾病传播模型SID等。

（2）生物大分子的结构、性质及功能：蛋白质与核酸是生命活动的主要执行者。对其结构与功能、相互作用和动态变化的研究，有助于揭示生命现象的本质。我们对若干重要的蛋白质（特别是膜蛋白）体系开展了深入系统的研究，并取得一系列重要成果。

（3）计算驱动的功能材料设计与应用：以多尺度模拟为指导，结合实验合成与表征手段，发展（催化）功能材料相关的新概念、新策略、新方法和新反应，在原子水平揭示材料特殊性质的结构基础、演变规律及反应机制，理解材料结构与功能的内在关联。

（4）机器学习在复杂体系中的应用：以机器学习为代表的人工智能在化学、生物、材料等领域的研究中正发挥越来越重要的作用。机器学习通过对大量数据的“学习”过程，寻找规则清晰但演化复杂的物理化学过程的科学规律。我们采用机器学习方法在量子力学精度的分子动力学模拟、化学逆合成路线分析、生命体集群行为及运动与脑功能相关课题开展了初步探索。研究工作正在进行中。

二、学生要求

（录取学生预期所达到的科研水平，包括但不限于理论知识、基础实验技能、文献检索、数据分析、科研思维等方面）

希望同学对化学以及相关学科（物理、生物、计算机等）有广泛的兴趣和深入研究的志向。有基本的科学素养和一定的科学思维能力，对于实验现象、实验结果有独立的思考能力和质疑精神，有一定的资料、文献查找和阅读能力。

三、助教团队成员

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 姓名 | 从事专业、方向 | 所在单位 |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |

四、修读计划（精读、泛读一栏打勾，可不填满或增加）

推荐书目或文献：

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 题目 | 作者 | 出版社或刊物名称 | 出版年月或卷期页码 | 精读 | 泛读 |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
| … |  |  |  |  |  |  |

五、参观计划

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 时间 | 地点 | 内容 | 人数 |
| 2023年春季 | 南京大学仙林校区 | 校园参观、课题讨论 | 6人 |
| 2023年暑期 | 南京大学仙林校区 | 课题中期研讨 | 6人 |