

## 杨忠志 教授 博士生导师



### 联系方式:

地 址: 大连市沙河口区黄河路850号

辽宁师范大学化学化工学院

邮 编: 116029

电 话: 0411-82159607

传 真: 0411-82158977

E-mail: [zzyang@lnnu.edu.cn](mailto:zzyang@lnnu.edu.cn)

## 个人情况综述

杨忠志, 教授, 分子与材料研究室主任, 博士生导师, 物理化学博士点学科带头人。多年来一直从事教学和科学研究工作。主要研究领域为: 论与计算化学及其应用, 化学和生物分子体系的模拟, 光电子能谱研究等。主要研究成果有: 创立了原子-键电负性均衡模型和方法(ABEEM)出和建立新的分子力学和分子动态模拟方法(ABEEM/MM/MD); 创立了分子形貌(Molecular Face)理论; 建立水体系的新模型; 提出了分子子局域动能新定义; 进行电子能谱实验及理论研究, 获得了原始创新性结果。

## 工作学习简历

1958.9 至1963.7 在吉林大学化学系学习, 大学毕业

1963.9 至1966.7 在吉林大学化学系学习, 研究生毕业, 导师: 唐敖庆

1980.11至1983.1 在瑞士Basel大学物理化学研究所, 博士学位, 导师: Edgar Heilbronner

1966.8至1972.10, 吉林大学化学系和理论化学研究室, 工作;

1972.11至1983.5, 吉林大学化学系和理论化学研究所, 助教、讲师、副教授;

1985.6至1990.6, 吉林大学理论化学研究所, 教授、量子化学研究室主任;

1990.7至1995.5, 吉林大学理论化学研究所, 教授、博导、所长;

1995.6至今, 辽宁师范大学化学系, 教授、博导、分子与材料研究室主任。

1980.8至1980.11, 瑞典Uppsala大学量子化学研究所, 访问学者;

1980.11至1983.1, 瑞士Basel大学物理化学研究所, 获博士学位;

1987.5至1988.5, 美国加州大学伯克利分校和LBL国立实验室, 访问学者;

1995.7至1996.5, 美国印第安那大学和北卡罗莱那州立大学, 访问学者;

1997.11至1998.2, 比利时Leuven大学, 合作研究。

## 教学工作

培养70多名硕士生和博士生, 2004年荣获“全国优秀教师”光荣称号。讲授研究生《量子化学》、《分子动态学》、《理论化学》, 以及本科生《化学时空》等多门课程。

## 主持科研项目

目前正执行国家自然科学基金重点项目—《生物分子水溶液体系中非共价相互作用的理论研究—探讨其分子识别机理及质子和能量传递过程(20633050)》和博士点基金项目。多次主持国家自然科学基金, 省教委和省科技厅基金。

## 代表性研究论文:

- 1、 Mechanism of Direct Conversion between C8 Adducts and N7 Adducts in Carcinogenic Reactions of Arylnitrenium Ions with Purine Nucleosides: A Theoretical Study, *J. Phys. Chem. B*, **2007**, 111, 13444-13450.
- 2、 Atomic Charge Calculation of Metallobiomolecules in Terms of the ABEEM Method, *J. Chem. Theory Comput.* **2007**, 3, 1561-1568.
- 3、 Modeling Mechanisms of Unusual Benzene Imine N6 Adduct Formation in Carcinogenic Reactions of Arylnitrenium Ions with Adenosine, *J. Org. Chem. Web. Release Date*, **2007-11-21**.
- 4、 Study of peptide conformation in terms of the ABEEM/MM method. *J. Comput. Chem.*, **2006**, 27(1): 1-10.
- 5、 Molecular dynamics simulations of alkaline-earth metal cations in water by atom-bond electronegativity equalization method fused into molecular mechanics. *J. Chem. Phys.*, **2005**, 123: 094507-094516.
- 6、 Ion Solvation in Water from Molecular Dynamics Simulation with the ABEEM/MM Force Field, *J. Phys. Chem. A (Letters)*, **2005**, **109**: 3517-3520
- 7、 Study of Lithium Cation in Water Clusters: Based on Atom-Bond Electronegativity Equalization Method Fused into Molecular Mechanics, *J. Phys. Chem. A*, **2005**, **109**: 4102-4111.
- 8、 Computational Study on the Reaction  $\text{CH}_2\text{CH}_2 + \text{F} \rightarrow \text{CH}_2\text{CHF} + \text{H}$ , *J. Phys. Chem. A*, **2005**, **109**: 4816-4823.
- 9、 Method and Algorithm of Obtaining the Molecular Intrinsic Characteristic Contours (MICCs) of Organic Molecules, *J. Comput. Chem.* **2005**, **26**(35-47).
- 10、 Hydration of  $\text{Li}^+$  ion in atom-bond electronegativity equalization method? P water: A molecular dynamics simulation study, *J. Chem. Phys.* **2005**, **122**, 84514-84528.
- 11、 An investigation of alkane conformations based on the ABEEM/MM model, *Chem. Phys. Lett.* **2005**, **403**: 242-247.
- 12、 Atom-bond electronegativity equalization method fused into molecular mechanics. I. A seven-site fluctuating charge and flexible body water potential function for water clusters, *J. Chem. Phys.* **2004**, **120** (6): 2541-2557.
- 13、 Polarization and bonding of the intrinsic characteristic contours of hydrogen and fluorine atoms of forming a hydrogen fluoride molecule based on an *ab initio* study, *J. Chem. Phys.* **2004**, **121** (8): 3452-3462.
- 14、 Atom-Bond Electronegativity Equalization Method fused into Molecular Mechanics. II. A Seven-Site Fluctuating Charge and Flexible Body Water Potential Function for Liquid Water, *J. Phys. Chem. A* **2004**, **108**(37): 7563-7576.
- 15、 Atom-Bond Electronegativity Equalization Method, I. Calculation of the Charge Distribution in Large Molecules, *J. Phys. Chem. A* **1997**, **101**(35): 6315-6321.
- 16、 The Influence of Substituents on Double-Bond Localization, e.g. in *s*-Indacene, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1987**, **26**(4): 360-362.
- 17、 The electronic structure of cyclophanes as suggested by photoelectron spectra, *Topics in Current Chemistry*, **1983**, **115**: 1-55.
- 18、 The out, out to out, in transition for 1,(n+2)-diazabicyclo[n.3.1]alkanes. *J. Am. Chem. Soc.*, **1993**, 115(15), 6580-6591.
- 19、 Azabicyclo[4,4,4]tetradec-5-ene. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, **1982**, 16, 940-942.

#### 主要代表著作

- 1、 杨忠志, 叶元杰, 唐敖庆著, 《大分子体系的量子化学》, 共51.2万字, 313页(16开本, 吉林大学出版社, 2005年, 长春。
- 2、 唐敖庆, 杨忠志, 李前树编著, 《量子化学》, 科学出版社, 北京, 1982, 共386页。
- 3、 王建祺, 杨忠志编著, 《紫外光电子能谱学》, 科学出版社, 北京, 1988, 共372页。
- 4、 译著: 王志中, 杨忠志译, 江元生校, 《轨道对称守恒》(R. B. Woodward and R. Hoffmann) 著科学出版社, 北京, 1978。

#### 获奖和荣誉情况:

- 1991年, 研究课题“大分子体系的理论化学研究及应用”获国家教委科技进步一等奖;
- 2002年, 研究课题“分子的电子结构研究及应用”获中国高校科学技术二等奖(第一完成人); 研究课题“关于分子的电子和空间性质的研究和应用”获辽宁省科学技术二等奖(第一完成人);
- 1990年《量子化学》一书获国家优秀教材一等奖;
- 1991年被国务院授予“有突出贡献的优秀专家”;
- 1997年被评为“大连市优秀专家”;
- 2004年荣获“全国优秀教师”光荣称号;
- 2005年被评为“辽宁省优秀专家”;

2008年研究课题“概念密度泛函理论及其应用”获中国教育部科学技术奖（自然科学奖）二等奖（第一完成人）。