陈文琦

Email: vincentwqchen@qq.com https://dantevincent.github.io Mobile: +86-15675282879



教育背景

清华大学

在读博士研究生,能源与动力工程系; GPA: 3.80/4.00

北京,中国

2019年9月-至今

华中科技大学

武汉, 中国

学士, 能源与动力工程学院; GPA: 90.63/100.00

2015年9月-2019年7月

工作/研究经历

理论与计算化学实验室

助研

清华大学,北京,中国

2019年9月-至今

- 气相化学反应动力学:通过理论计算手段,计算气相化学反应中感兴趣的物理/化学参数(如:化学反应速率常数,反应分支比,潜在反应路径等);并协助相关气相反应动力学的理论计算模型的开发。
- 。 **原子核非简谐运动识别与矫正**:在真实环境中,原子核的某些运动往往呈现非简谐运动趋势,此使简谐振子模型不再适用。开发算法用以识别原子核的非简谐运动模式,并构建物理模型进行相应矫正。

能源利用中的物理化学(英文授课)

清华大学,北京,中国

助教

2022年2月-2022年7月

获奖情况

• 清华之友—天洑软件英才奖学金

清华大学,北京,中国

2022年9月

• 优秀毕业生 华中科技大学,武汉,中国

2019年7月

代表文章

- Chen W, Guo X, Chen L, et al. A kinetics study on hydrogen abstraction reactions of cyclopentane by hydrogen, methyl, and ethyl radicals[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2021, 23(12): 7333-7342.
- Chen W, Zhang, P, Truhlar D G, et al. Identification of Torsional Modes in Complex Molecules Using Redundant Internal Coordinates: The Multistructural Method with Torsional Anharmonicity with a Coupled Torsional Potential and Delocalized Torsions[J]. Journal of Chemical Theory and Computation, 2022. (Accepted)

技能

- 编程语言:
 - 。 熟练: Python, Matlab, Fortran
 - 熟悉: C++, C
 - **补充信息**: 过去项目大多集中于对已有的计算软件进行 debug(主要为 Python、Fortran 项目, 少量 C++、java 项目), 补充新算法等; 有 Matlab, Python(tkinter) 编写程序 GUI 经历; 有编写 Python 爬虫脚本经历。
- 英语: 六级: 559; 有同国外研究人员合作经历