# 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

清华大学,北京,中国

助研

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。

#### 中冶长天国际工程有限责任公司

长沙,湖南,中国

实践

2021年07月-2021年08月

- **活性炭吸附塔** SO<sub>2</sub> **吸附模型构建**: 基于有限元思想, 构建活性炭吸附塔 SO<sub>2</sub> 吸附模型, 从而指导工业上吸附塔工艺 参数 (如吸附塔自身参数, 活性炭下料速度等) 的设定。
- Joseph S. Francisco 院士实验室 (获国家公派出国留学资助)

宾夕法尼亚大学, 费城, 美国 (疫情留京)

助研

2021年10月-2023年04月

○ **星际环境中的气相化学反应动力学**:通过理论计算手段,研究重要物质的反应性与光化学机制;并协助相关实验表征。

# 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

# 代表文章

• 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, 18(12): 7671-7682.

## 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