



袁琦璐 博士研究生

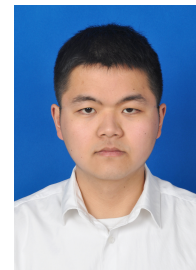
✉ qiluyuan@foxmail.com

💬 YQL_PHD

📞 18086810837

🌐 CSDN: 愿无畏裁

🌐 <https://yuanqilu.top/>



教育经历

- 2021.9-2026.6 **中国科学技术大学** (华五/C9/双一流 A/985), 安徽, 合肥
专业: 高分子化学与物理, 理学博士 GPA: 3.65/4.0
- 2017.8-2021.6 **中国海洋大学** (双一流 A/985), 山东, 青岛
专业: 高分子材料与工程, 工学学士 GPA: 3.29/4.0

专业技能

- 分子动力学模拟 **熟练使用 LAMMPS 与 GROMACS 等软件进行各类分子动力学模拟, 也能够编写简易的分子动力学模拟程序。**
- 掌握分子动力学模拟中的全原子建模。**
- 掌握中间散射函数、静态结构因子、应力自关联函数等统计物理性质计算。**
- 熟悉分子动力学模拟中自由能计算的原理, 能够进行相应的计算。**
- 高分子物理 **精通高分子玻璃化理论, 并能够进行相应的理论模拟与数据分析。**
- 熟悉高分子流变学理论, 并能够进行相应的理论模拟与数据分析。**
- AI 与机器学习 **了解各项基本的机器学习算法, 了解 TensorFlow, PyTorch 框架, 能够使用其进行科学研究。**
- 程序语言 **熟练掌握 Python, C++, Fortran, 能编写程序进行科学计算与数据分析。**
- 熟悉 Linux 系统命令行操作与 Bash 自动化脚本编写。**
- 计算机基础 **了解计算机组成原理, 如指令与运算, 内存, IO 系统等原理; 熟悉计算机网络, HTTP 协议, TCP/IP 协议等; 了解操作系统, 如进程管理, 内存管理, 文件系统等。**
- 实验 **熟悉 SEM、TEM、XRD、红外吸收光谱、紫外分光光谱、拉曼光谱、热重等材料测试手段, 掌握有机化学合成方法。**
- 其他 **掌握 Office 三件套, Origin, L^AT_EX, chemoffice, VMD 等软件。**

科研经历

高分子与软物质玻璃体系的理论与模拟研究 (2022.3-2026.6)

- 采用合适的分子模型, 模拟一系列具有不同分子量, 热力学条件, 拓扑结构的分子, 降温得到过冷的玻璃化液体。
- 探究高分子的分子量, 单体结构, 链刚性等条件对体系玻璃化性质的影响, 并分析了其与物理起源。
- 探究玻璃化液体中的动力学异质性与解耦合关系, 建立其与体系高温活化自由能之间的联系。
- 探究不同类型的玻璃化理论模型的区别与联系, 统一了基于不同性质的玻璃化理论模型。

软物质体系结构与动力学的机器学习研究 (2024.6-2026.6)

- 采用 AP 聚类算法分类出体系微观结构, 并建立起其与动力学性质之间的关联。
- 采用神经网络基于玻璃体系的微观结构预测其动力学性质。

聚丙烯酸酯拉伸流变模拟 (2024.12-2026.6)

- 实验上观测到 PMMA 与 PMA 在单体结构相近的情况下出现了完全不同的拉伸流变行为, 因此采用分子动力学模拟对 PMMA 和 PMA 进行拉伸流变测试。

科研经历 (continued)

- 分析了其拉伸流变行为差异的微观分子机理。
- ### 遥爪型聚丙二醇电解质的链段动力学 (2022.3-2024.3)
- 聚丙二醇为典型的聚合物电解质基质，选取玻璃化转变温度低、氢键缔合基团位于链端的非晶遥爪型聚丙二醇模型体系，合成了一系列具有不同端基的遥爪型高分子。
 - 利用宽频介电谱、差示量热扫描分析、X 射线散射法和高分子玻璃化熵理论等方法研究了不同端基和不同分子量的遥爪型聚丙二醇的动力学。

海藻纤维素材料的制备与改性研究 (2020.3-2021.3)

- 基于浒苔与海带两种海洋藻类，通过一系列处理成功提取出了浒苔纤维素和海带纤维素，并对两种纤维素进行了一系列表征。
- 通过 SEM 图像的分析，海带纤维素在微观尺度上为由纤维网状结构所构成，而浒苔纤维素中并不存在这一结构，导致了海带纤维素力学性能远远优于浒苔纤维素。

耐高温铈基材料在多类型催化氧化反应中的应用 (2018.9-2020.6)

- 通过水热法、等体积浸渍法等方法制备了一系列纳米 Ag/CeO₂ 材料，通过设计对照实验对样品在实际应用中的性能进行了探究。
- 为了更好地了解 Ag/CeO₂ 催化剂的性能并探究其耐用性和应用性，从而更好地对 Ag/CeO₂ 进行应用和推广，探究了样品在高温老化前后对碳烟和 CO 催化性能的变化，并对老化前后催化剂结构进行了探究。

学术论文

- 1 Yuan, Q.-L.; Dong, Y.-T.; Yang, Z.-Y.; Douglas, J. F.; Starr, F. W.; Xu, W.-S. **2025**, under review.
- 2 Yuan, Q.-L.; Xu, X.; Douglas, J. F.; Xu, W.-S. **2025**, under review.
- 3 Yuan, Q.-L.; Xu, X.; Douglas, J. F.; Xu, W.-S. *J. Phys. Chem. B* **2024**, 128, 10999–11021.
- 4 Yuan, Q.-L.; Xu, X.; Douglas, J. F.; Xu, W.-S. *J. Phys. Chem. B* **2024**, 128, 9889–9904.
- 5 Yuan, Q.-L.; Yang, Z.; Xu, W.-S. *Sci. Sin. Chim.* **2023**, 53, 616–627.
- 6 Cao, Y.; Yuan, Q.-L.; Chen, Q.; Xu, W.-S. *Macromolecules* **2025**, 58, 2829–2849.
- 7 Douglas, J. F.; Yuan, Q.-L.; Zhang, J.; Zhang, H.; Xu, W.-S. *Soft Matter* **2024**, 20, 9140–9160.
- 8 Song, X.-Y.; Yang, Z.-Y.; Yuan, Q.-L.; Li, S.-W.; Tang, Z.-Q.; Dong, Y.-T.; Jiang, S.-C.; Xu, W.-S. *Chinese J. Polym. Sci.* **2023**, 41, 1447–1461.

其他亮点

- 个人荣誉
- 2017-2021 连续获得学习奖学金, 2021-2025 连续获得学业奖学金
 - 中国科学院长春应化所优秀生源奖学金, 中国化学会 2023 年软物质理论计算与模拟学术会议优秀墙报
- 证书
- 计算机二级; 普通话二级乙等, 英语 (CET-6、CET-4)
- 实习
- 专业实习: 泰山玻纤