



## 白丽宜

釜山大学，计算物理化学  
1992.09.18

+86 -18379052918

bailiyi@westlake.edu.cn

杭州 · 西湖区

liyibaipnu.github.io

### 教育和工作经历

#### 西湖大学（博士后）

2021.04-至今

理学院凝聚态物理专业、多尺度材料模拟实验室、合作导师：刘仕

浙江 · 杭州

- 锂离子水系电解液机器势能开发、二维铁电材料极化翻转动力学

#### 釜山大学（博士）

2015.09-2021.02

纳米融合技术专业、计算物理化学方向、导师：Joonkyung Jang、7次国家奖学金

韩国 · 釜山

- Thesis: “Theoretical and Computational Investigation on Hydration Layer Probed by Atomic Force Microscopy.”

#### 中原工学院（本科）

2011.09-2015.07

高分子材料与工程专业、平均分：86/100、三好学生、2次国家励志奖学金

河南 · 郑州

#### 樟树中学（高中）

2008.09-2011.06

江西省省重点高中、重点班

江西 · 樟树

### 研究领域

- AI4Science、深度势能分子动力学、经典分子动力学、第一性原子分子动力学、密度泛函理论计算
- 基于深度学习的水系高盐浓度电解液的势能开发和离子传输特性研究
- 基于深度学习的二维铁电功能材料的势能开发和极化翻转动力学研究
- 分子动力学对水合层的相变，结构以及动力学探究
- 固液界面水的和频光谱模拟
- 水在受限体系的相变，超疏水纳米材料的设计

### 活动经历

#### 釜山大学暑期学校 “Computer Simulation with LAMMPS”

2018.08 / 2017.07

培训师，教授高中生分子模拟软件的使用及其原理

韩国 · 釜山

#### 中科院高能物理研究所，高兴发教授课题组

2016.06-2016.07

访问学生，学习第一性原理软件使用

中国 · 北京

### 口头及展板发表

- Poster presentation “Phase, Structure, and Dynamics of the Hydration Layer Probed by Atomic Force Microscopy”, KCS-PyhsChem Summer Symposium. (2019.7.8-10)

2. Oral presentation “Dewetting Transition of Water Confined between Atomically Rough Surfaces”, Japan-Korea Student Workshop: Hiroshima University and Pusan National University. (2018.11.15-17, Hiroshima University, Japan)
3. Poster presentation “Dewetting Transition of Water Confined between Atomically Rough Surfaces”, KCSPyhsChem Summer Symposium. (2018-7.9-11)
4. Poster presentation “界面水分子受限结构与动力学研究”，第十二届全国软物质与生命物质物理学术会议. (2022.10.29-30, 浙江·温州)

## 学术论文

---

1. **Bai, L.** *et al.* Deep Learning of Accurate Force Field of Water-in-salt Electrolytes. *In Preparation.*
2. **Bai, L.** *et al.* Ab initio Molecular Dynamics Study on Vibrational Sum Frequency Generation of Water at Hydrophobic/hydrophilic Surfaces. *In Preparation.*
3. **Bai, L.** C. Ke, T. Zhu, S. Liu.(2023). Intrinsic ferroelectric switching in two dimensions. **arXiv:2307.09211. submitted.**
4. Wu, J., **Bai, L.(co-first author)**, Huang, J., Ma, L., Liu, J., Liu, S. (2021). Accurate Force Field of Two dimensional Ferroelectrics from Deep Learning. *Physical Review B*, 104(17), 174107. (JCR: Q1)
5. **Bai, L.**, Kim, K., Ha, M. Y., Ahn, Y., Jang, J. (2021). Molecular Insights on the Wetting Behavior of a Surface Corrugated with Nanoscale Domed Pillars. *Langmuir* 37, 31, 9336–9345. (JCR: Q1)
6. Zhang, Z., **Bai, L.(co-first author)**, Chung, S., Jang, J. (2021). Effects of the Wettability of a Probing Tip on the Hydration Layer Imaged in Atomic Force Microscopy. *The Journal of Physical Chemistry C*, 125, 11197–11205. (JCR: Q1)
7. **Bai, L.**, Zhang, Z., Jang, J. (2019). Phase, Structure, and Dynamics of the Hydration Layer Probed by Atomic Force Microscopy. *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(35), 21528-21537. (JCR: Q1)
8. **Bai, L.**, Jang, J., Zhang, Z., Jang, J. (2018). Dewetting transition of water confined between atomically rough surfaces: A lattice gas Monte Carlo simulation study. *Chemical Physics Letters*, 694, 29-34. (JCR: Q2)
9. Zhao, M., **Bai, L.**, Jang, J. (2020). Underwater adhesion of mussel foot protein on a graphite surface. *Applied Surface Science*, 511, 145589. (JCR: Q1)
10. Kim, K., Choi, S., Zhang, Z., **Bai, L.**, Chung, S., Jang, J. (2022). Molecular Features of Hydration Layers: Insights from Simulation, Microscopy, and Spectroscopy. *The Journal of Physical Chemistry C*. 126(21), 8967–8977. (JCR: Q1)

## 知识技能

---

<b>Programming Languages/Tools</b>	Fortran, Matlab, Python, Bash, L <sup>A</sup> T <sub>E</sub> X, Markdown
<b>Simulation Software/Tools</b>	LAMMPS, VMD, VASP, CP2K, Materials Studio, Packmol, VESTA, OVITO
<b>Deep Learning</b>	DeepMD-Kit, Keras

## 个人简述

---

计算物理化学博士，专注于深度势能分子动力学模拟、第一性原理计算和人工智能辅助（AI4Science）的材料设计。博士期间，主要研究包括液体动力学、相变行为和界面性质等软凝聚态物理领域的问题；使用多种计算方法和模拟技术，深入探索软物质系统的结构和动力学行为。博士后阶段，专注于锂离子水系电解液和二维材料的研究，利用计算模拟和机器学习方法，设计和优化具有高性能的电解液和二维材料。本人具备扎实的理论基础和广泛的实践经验，能够独立进行复杂的计算模拟和数据分析，以推动材料科学和能源领域的研究进展。