

# 徐龙坤

☎ +61 0422985694    ✉ [Longkun.Xu@anu.edu.au](mailto:Longkun.Xu@anu.edu.au)    🏠 <https://longkunxuluke.github.io/>

## 🎓 教育经历

澳大利亚国立大学 2018.10 – 2021.10  
博士生    专业：化学 堪培拉，澳大利亚

- 博士论文题目：关于改进隐溶剂模型准确度以及复杂溶剂环境中静电催化的研究
- 研究兴趣1：外电场下离子液体的结构和性质
- 研究兴趣2：复杂溶剂环境中静电催化
- 研究兴趣3：改进隐溶剂模型准确度

四川大学 2015.09 – 2018.6  
硕士    专业：应用化学 成都，中国

- 硕士论文题目：关于电荷转移激发态非平衡溶剂化效应的理论研究
- 研究兴趣：非平衡溶剂化以及溶剂重组能
- GPA: 3.72/4.00

青岛农业大学 2011.09 – 2015.06  
本科    专业：材料化学 青岛，中国

- 毕业论文题目：可生物降解聚合物的合成及其在药物输运中的应用
- GPA: 3.20/4.00

## 💼 工作经历

MDPI出版社 2018.07 – 2018.09  
助理编辑 北京，中国

- 作为Materials和High-throughput期刊的助理编辑，我主要负责协助两个期刊审稿过程(包括寻找专家、审稿人、排版)以及特刊的建立

## 📖 公开成果

完整的论文列表可以查看我的[谷歌学术](#)。

[8] Yan B Vogel, Cameron W Evans, Mattia Belotti, Longkun Xu, Isabella C Russell, Li-Juan Yu, Alfred KK Fung, Nicholas S Hill, Nadim Darwish, Vinicius R Gonçalves, Michelle L. Coote, K. Swaminathan Iyer and Simone Ciampi. "The Corona of A Surface Bubble Promotes Electrochemical Reactions" Nat. Commun. 2020 11 (1), 1–8. (第一计算作者)

[7] Longkun Xu, Ekaterina I Izgorodina and Michelle L Coote. "Ordered Solvents and Ionic Liquids Can be Harnessed for Electrostatic Catalysis" J. Am. Chem. Soc. 2020 142 (29), 12826–12833.

[6] Longkun Xu and Michelle L Coote. "Improving the Accuracy of PCM-UAHF and PCM-UAKS Calculations Using Optimized Electrostatic Scaling Factors" J. Chem. Theory Comput. 2019 15 (12), 6958–6967.

[5] Longkun Xu and Michelle L Coote. "Methods To Improve the Calculations of Solvation Model Density Solvation Free Energies and Associated Aqueous pKa Values: Comparison between Choosing an Optimal Theoretical Level, Solute Cavity Scaling, and Using Explicit Solvent Molecules" J. Phys. Chem. A. 2019 123 (34), 7430–7438.

[4] Ting-Jun Bi, Long-Kun Xu, Fan Wang and Xiang-Yuan Li. "Solvent effects for vertical absorption and emission processes in solution using a self-consistent state specific method based on constrained equilibrium thermodynamics" Phys. Chem. Chem. Phys. 2018 20 (19), 13178–13190. (2018 PCCP HOT Articles)

[3] Mei-Jun Ming, Long-Kun Xu, Fan Wang, Ting-Jun Bi and Xiang-Yuan Li. "Theoretical study on electronic excitation spectra: A matrix form of numerical algorithm for spectral shift" Chem. Phys. 2017 492, 27–34.

[2] Long-Kun Xu, Ting-Jun Bi, Mei-Jun Ming, Jing-Bo Wang and Xiang-Yuan Li. "Photoinduced charge-transfer electronic excitation of tetracyanoethylene/tetramethylethylene complex in dichloromethane" Chem. Phys. Lett. 2017 679, 158-163.

[1] Ting-Jun Bi, Long-Kun Xu, Fan Wang, Mei-Jun Ming and Xiang-Yuan Li. "Solvent effects on excitation energies obtained using the state-specific TD-DFT method with a polarizable continuum model based on constrained equilibrium thermodynamics" Phys. Chem. Chem. Phys. 2017 19 (48), 32242-32252.

## ⚙️ 专业技能和知识结构

- 计算化学：我有6年(2015-2021)的计算化学经验,熟悉计算化学领域的多个方面，熟练使用以下相关软件：
  - 量子化学：Gaussian, ORCA, Q-Chem, GAMESS-US, Molpro, xtb, MOPAC, COSMOtherm, ADF, 等
  - 分子动力学：LAMMPS, TRAVIS, 等
  - 材料模拟：VASP, 等
  - 波函数分析：Multiwfn, 等
  - 分子可视化：GaussView, IQmol, CYLview, VMD, PyMol, Avogadro, 等
- 计算机科学：我熟悉计算机科学的基础知识，譬如基础数据结构和算法、数据库等，熟悉多种编程语言，包括Shell, Python, Fortran, SQL, 等，我的[力扣](#)链接。
- 机器学习：我熟悉机器学习的基础理论，了解scikit-learn, TensorFlow 等机器学习平台。
- 数据科学：我熟悉数据科学基础理论，熟悉Pandas, NumPy, SciPy, Matplotlib, MySQL, MongoDB, 等常用工具。
- 论文写作：熟悉LaTeX, Word, Markdown, 等多种编辑工具。
- 量子计算：对量子计算机以及IBM quantum平台有初级的了解，曾经参加过悉尼大学Ivan Kassal教授开设的量子计算课程。
- 语言：中文(母语), 英文(雅思7.0)

## ♥️ 获奖情况

Postgraduate Research Support	2020
HDR Fee Remission Merit Scholarship	2018-2021
ANU PhD Scholarship (International)	2018-2021
四川大学硕士生二等奖学金	2015-2018
青岛农业大学海利尔奖学金	2013

## 📄 其他

- 美国化学会The Journal of Physical Chemistry审稿人
- 中国化学会会员
- 个人网站(英文): <https://longkunxuluke.github.io/>
- GitHub: <https://github.com/longkunxuluke/>