

徐龙坤

☎ 15066717920 ✉ longkunx@gmail.com 🏠 <https://longkunxuluke.github.io/>

📁 教育和工作经历

SAIT China Lab, 三星电子中国研究院 2021.12 – 现在
Engineer (2022.05-现在), 实习生(2021.12-2022.05) 北京, 中国

- 拓展基于机器学习的材料计算算法
- 结合深度学习方法(图神经网络)和计算化学方法(量子化学计算和分子动力学模拟)设计电池材料、显示发光材料和半导体材料等新型材料
- 跟踪行业发展, 开展行业研究, 与Top高校和研究院所课题组开展合作与交流

澳大利亚国立大学 2018.10 – 2022.04
博士 (全奖) 专业: 计算化学 堪培拉, 澳大利亚

- 博士期间发表5篇SCI论文, 包括2篇JACS和1篇Nature Communication顶刊文章, 研究成果被EurekAlert!, PHYS.ORG 和 Chemistry in Australia等媒体报道
- 项目一: 应用LAMMPS开展离子液体的可极化分子动力学模拟, 应用Numpy, Pandas and Python脚本分析分子动力学轨迹和研究外电场下离子液体的结构和性质, 见论文[7][9]
- 项目二: 应用多尺度的量子化学和分子动力学方法研究复杂溶剂环境中的静电催化, 应用Python脚本自动化计算和结果分析, 见论文[7][8]
- 项目三: 在电动力学和量子力学框架下优化连续介质溶剂模型的参数以提升其精度, 对SMD和PCM溶剂化模型分别提出“mixed theoretical level”和“mixed ESF”方法来提升小分子pKa和氧化还原势的计算, 对某些体系预测pKa精度提升9个pKa unit, 见论文[5][6]
- 更多详细内容可以参考个人网站

MDPI出版社 2018.07 – 2018.09
助理编辑 北京, 中国

- 负责协助Materials和High-throughput两个期刊的全程审稿过程, 包括评估论文质量、寻找专家和审稿人以及初期排版
- 构思特刊的主题以及协助建立特刊的全过程

四川大学 2015.09 – 2018.06
硕士 (全奖) 专业: 应用化学 成都, 中国

- GPA: 3.72/4.00
- 研究生入学成绩专业第一, 硕士期间发表4篇SCI论文
- 在连续介质电动力学和约束平衡热力学的理论框架下发展非平衡溶剂化自由能和溶剂重组能的计算, 并将其应用于电子激发态的理论研究以及数值程序开发, 见论文[1]-[4]
- 更多详细内容可以参考个人网站
- 主要课程: 数理方法、数值分析、计算化学、生物信息学

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

- GPA: 3.20/4.00
- 学生会外联部部长
- 主要课程: 计算机基础、高等数学、线性代数、大学物理学、概率论与数理统计、计算机在化学中的应用、物理化学

📄 公开成果

完整的论文列表可以查看我的[谷歌学术](#).

- [9] Mattia Belotti, Xin Lyu, **Longkun Xu**, Peter Halat, Nadim Darwish, Debbie S Silvester, Ching Goh, Ekaterina I Izgorodina, Michelle L Coote, Simone Ciampi. "Experimental Evidence of Long-Lived Electric Fields of Ionic Liquid Bilayers" J. Am. Chem. Soc. **2021** 143 (42), 17431–17440. (第一计算作者)
- [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：7年(2015-2022)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
 - 神经网络势：参加了Deep Modeling社区第一届哥伦布训练营 [\[证书链接\]](#)，熟悉DeepMD-kit和DP-GEN的原理和使用
 - 其它：Openbabel, RDKit
- 计算机科学：
 - 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，具有扎实代码能力[\[力扣链接\]](#)
 - 参加了澳洲NCI超算和Intersect Australia联合组织的多个编程语言课程，熟悉多种编程语言包括Shell, Python [\[证书链接\]](#), R [\[证书链接\]](#), Julia [\[证书链接\]](#), Fortran等
 - 完成了Coursera “SQL for Data Science” 课程，熟悉应用MySQL处理和分析数据 [\[证书链接\]](#)
 - 熟悉Linux系统, Vim和VScode编辑器, RStudio, Conda系统, Github 以及 Jupyter
 - 2021年参加了澳洲NCI超算和英伟达组织的N-Ways GPU Bootcamp, 学习了关于GPU编程的基础知识
 - 熟悉高性能计算以及相关工具，比如ssh, pbs, CUDA等 [\[证书链接\]](#)
 - 熟悉网络爬虫常用工具Scraper, Scrapy等[\[证书链接\]](#)

- 机器学习和数据科学:
 - 熟悉机器学习和数据科学的基础理论
 - 了解scikit-learn, JAX, TensorFlow, pytorch 等机器学习和深度学习框架
 - 熟悉Pandas, NumPy, SciPy, Matplotlib, MySQL 等常用工具
- 数学、物理和化学知识:
 - 熟悉线性代数、微积分、概率论与数理统计等基础数学知识
 - 熟悉量子力学、统计热力学、电动力学等基础物理知识
 - 熟悉材料科学、有机化学、无机化学、物理化学、分析化学等材料化学知识
- 科学写作: 熟悉LaTeX, Word, Markdown等多种写作工具。
- 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

i 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/>
 - 兼职老师, 在多家平台辅导伦敦大学学院(UCL)、约克大学(University of York)、华威大学(University of Warwick)、中国石油大学等院校学生, 辅导内容包括高分子、计算化学、机器学习、R语言、科研论文写作等