

张旻烨

Min-Ye Zhang

海淀区颐和园路 5 号, 勺园四号楼 318

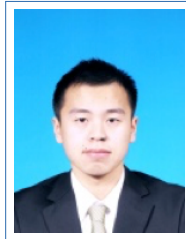
100871, 北京

+86 188 1050 7549

stevezhang@pku.edu.cn

shigaro.org

https://github.com/minyez



教育背景

2015.9

北京大学 化学与分子工程学院, 博士研究生, 理论与计算化学 (预期 2020 年毕业). 导师: 蒋鸿 研究员.

2011.9

2015.7

北京大学 化学与分子工程学院, 理学学士, 化学, GPA: 3.41/4.

技能

理论工具 密度泛函理论, 多体理论
编程语言 Python, Fortran, Bash, MPI 并行, C (基础)
开发工具 Vim, VS Code, Git, Makefile, Mathematica*
文档写作 L^AT_EX, Markdown, Jupyter Notebook

计算软件 VASP, WIEN2K, ABINIT, GPAW, FHI-GAP
科学库 Intel® MKL, spglib, FFTW3, PHONOPY, ASE
可视化 Matplotlib, Xmgrace, Adobe® Photoshop
外语能力 CET6 (550), JLPT N1 (113)

经历

科研项目

2017.9

基于 LAPW 框架的超越密度泛函理论的第一性原理电子结构方法与程序开发, 博士课题.

- 调试 / 维护 / 优化课题组自研的多体微扰理论 *GW* 全电子计算 Fortran 程序 FHI-GAP;
- 推导混合基组下的截断库仑势, 实现低维材料体系自能关于模型参数的加速收敛;
- 实现 ACFDT-RPA 电子相关能全电子计算, 调试与 WIEN2K 的接口, 测试并行可靠性.

2016.8

2017.3

核壳结构 Fe@FeP 纳米颗粒催化氢产生反应的理论研究, 合作课题.

- 构建 Fe@FeP 界面表面模型与不同表面位点的氢吸附模型, 进行密度泛函的第一性原理计算;
- 在考虑零点能与振动熵情况下验证了 Fe@FeP 阴极反应自由能变接近于零, 佐证其实验上优良催化性能.

2015.12

2018.4

二硫化亚铁 FeS₂ 晶相平衡态热稳定性的理论研究, 博士课题.

- 基于 ACFDT-RPA 方法, 在计算上首次得到与实验值处于同一数量级的 FeS₂ 黄铁矿相到白铁矿相的转化焓;
- 通过构造有效带隙描述符, 从电子结构差别上解释了黄铁矿相热稳定性来源及传统密度泛函近似失效的原因.

2017.10

从头算程序输入输出文件前后处理的 Python 脚本集 *mykit*, 独立项目.

- 适用于多种从头算程序, 实现关键词映射, 允许不同程序输入文件的近似相互转换;
- GitHub 开源. 支持连续集成、自动化测试与覆盖度计算 (4061 行 77.2%).

学生工作

2015.9

2017.7

支部书记, 北京大学化学与分子工程学院 2015 级研究生党支部.

- 统筹支部党员发展、策划党团日活动、定期召开支部生活会和党员大会;
- 组织党团日获校级三等奖 (2016), 本人获评学院优秀党员.

2011.9

2015.7

班长, 北京大学化学与分子工程学院 2011 级本科生一班.

论文发表

2019.9

第一作者, 预印本, Electronic Band Structure of Cuprous and Silver Halides: an All-Electron *GW* Study. arXiv:1906.02472 (2019).

2018.10

第三作者, *IF*=7.329, Doubly Screened Hybrid Functional: an Accurate First-Principles Approach for Both Narrow- and Wide-Gap Semiconductors. *J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, 9, 2338-2345.

2018.3

第一作者, *IF*=10.733, Relative Stability of FeS₂ Polymorphs with the Random Phase Approximation Approach. *J. Mater. Chem. A* **2018**, 6, 6606.

获得奖项

2017.10

先锋物理化学奖学金, 校级.

2016.10

校长奖学金, 王世仪奖学金, 校级.

2015

2019

三好学生 (×3), 三好学生标兵, 校级.

2011

2015

五四奖学金, 先锋奖学金, 校级.

其他活动

- 助教 中级物理化学 (2017、2018 春季学期).
- 翻译 日语访谈和字幕制作; 英文科普文章, 即将发表于《环球科学》杂志.
- 博客 搭建个人主页撰写科学计算相关技术博客.
- 跑步 舒缓压力. 7 公里配速 4'30.
- 篮球 担任院队首发, 蝉联北大硕博杯院系篮球赛冠军.