

# 个人简历

邮箱: chenqu@vip.126.com

## 基本信息

姓 名:	陈曲	出生日期:	1984.10
民 族:	汉	籍 贯:	浙江杭州
毕业学校:	浙江大学	学 历:	博士
专 业:	物理化学	政治面貌:	共青团员

## 教育背景

2014.02-2015.02	荷兰代尔夫特理工 过程能源实验室 博士后 导师: Prof. Thijs J. H. Vlugt
2007.09-2014.03	浙江大学理学院化学系理学博士 导师: 王琦教授
2007.07-2007.08	美国北卡罗来纳州立大学化学与生物工程系访问交流 导师: Prof. Keith E. Gubbins
2003.09-2007.06	浙江大学 理学院化学系 理学学士 辅修英语

## 研究方向

- 微孔扩散: 利用分子动力学模拟研究微孔材料中流体的扩散传质
  - 药物控释: 利用分子动力学模拟研究多肽药物与微孔材料之间的相互作用
  - 碳捕获: 利用蒙特卡罗模拟研究气体在离子液体及其他溶剂中的吸附
- 关键词: 微孔材料; 药物控释; 离子液体; 碳捕获; 扩散吸附

## 发表论文

- Q. Chen, S. P. Balaji, M. Ramdin, J. J. Gutiérrez-Sevillano, A. Bardow, E. Goetheer and T. J. H. Vlugt. Validation of CO<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>O Analogy using Molecular Simulation. *Ind. Eng. Chem. Res.* 53(46), 18081-18090, 2014
- Q. Chen, M. Ramdin, A. Bardow and T. J. H. Vlugt. Solubility of the Gases CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, CO, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O and H<sub>2</sub>S in Physical Solvents from Monte Carlo Simulations (submitted)
- M. Ramdin, Q. Chen, S. P. Balaji, J. M. Vicent-Luna, A. Torres-Knoop, D. Dubbledam, S. Calero, T. W. de Loo and T. J. H. Vlugt. Solubilities of CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, and SO<sub>2</sub> in Ionic Liquids and Selexol from Monte Carlo Simulations. *J. of Computational Science*

4. M. Ramdin, S. P. Balaji, J. M. Vicent-Luna, A. Torres-Knoop, Qu Chen, D. Dubbledam, S. Calero, T. W. de Loo, and T. J. H. Vlugt. Computing Bubble-Points of CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> Gas Mixtures in Ionic Liquids from Monte Carlo Simulations (accepted by *Fluid Phase Equilibria*).
5. Q. Chen, Q. Wang, Y. Liu, and T. Wu. The Effect of Hydrogen Bonds on Diffusion Mechanism of Water inside Single-Walled Carbon Nanotubes. *J. Chem. Phys.* 140, 214507, 2014.
6. Q. Chen, J. D. Moore, Y. Liu, T. J. Roussel, Q. Wang, T. Wu, and Keith E. Gubbins. Transition from Single-file to Fickian Diffusion for Binary Mixtures in Single-walled Carbon Nanotubes. *J. Chem. Phys.* 133, 094501, 2010.
7. Q. Chen, Q. Wang, Y. Liu, T. Wu, Y. Kang, J. D. Moore, and Keith E. Gubbins. Energetics Investigation on Encapsulation of Protein/Peptide Drugs in Carbon Nanotubes. *J. Chem. Phys.* 131, 015101, 2009.
8. Q. Chen, L. Liang, Z. Zhang Y. Liu, and Q. Wang. The Release of Peptide from Carbon Nanotubes Driven by Electric Field. (submitted to *J. Phys. Chem. C*)
9. Y. Kang, Q. Wang, Y. Liu, T. Wu, Q. Chen, and W. Guan. Dynamic Mechanism of Collagen-like Peptide Encapsulated into Carbon Nanotubes. *J. Phys. Chem. B* 112(15), 4801, 2008.
10. Y. Liu, J. D. Moore, Q. Chen, T. J. Roussel, Q. Wang, and K. E. Gubbins. Crossover from Single-file to Fickian Diffusion in Carbon Nanotubes and Nanotube Bundles: Pure Components and Mixtures. *Proceedings of the Diffusion Fundamentals III Conference*, 164-180, 2009.
11. Q. Wu, Q. Chen, X. Cai, J. Wang, and J. Zhang. Preparation and Conductivity of Solid High-proton Conductor Silica Gel Containing 80 wt.% Decatungstodivanadogermanic Acid *Materials Letters* 61(3), 663, 2007.

## 学术活动

---

1. 欧洲应用热力学会议 (European Symposium on Applied Thermodynamics) 2014.6 荷兰埃因霍温  
**Poster Section:** The Effect of Hydrogen Bonds on Diffusion Mechanism of Water inside Single-Walled Carbon Nanotubes
2. CPMD会议 (CPMD Program) 2011.8 西班牙巴塞罗那  
**Poster Section:** The Role of Hydrogen Bond in Water Diffusion inside Carbon Nanotubes
3. 第三届扩散会议 (Diffusion Fundamentals III) 2009.8 希腊雅典  
**Poster Section:** Bimodal Diffusion of Binary Lennard Jones Mixtures in Atomically Detailed Single-Walled Carbon Nanotubes
4. 日本东北大学暑期科技交流 (纳米技术) 2008.7 日本仙台

## 研究方法

---

模拟方法:

分子动力学模拟 (Molecular Dynamics) ; 蒙特卡罗模拟 (Monte Carlo Method)

模拟软件:

NAMD, Gromacs, Raspa, Material Studio

编程语言:

Fortran, C, Matlab, LaTeX, shell-scripting

## **教学经历**

---

2009–2013（每年春夏学期）      助教    化学生物学实验（本科生）

参与讲课、教材编写、指导学生做实验

## **主要奖励**

---

1. 2011 学年    浙江大学    优秀研究生二等奖
2. 2010 学年    浙江大学    优秀研究生二等奖
3. 2007 学年    浙江大学    优秀毕业论文（设计）
4. 2006 学年    浙江大学    研究创新奖学金一等奖
5. 2006 学年    “华义杯” 浙江省第二届化学实验技能大赛 个人知识之星 团体一等奖
6. 2005 学年    浙江大学    理科国家奖学金三等奖
7. 2002 学年    杭州市英语演讲比赛冠军（一等奖第一名）

## **外语水平**

---

Chinese (native), English (proficient), German (conversant), French (basic)