

邱宗仰

邮箱: qiuzongyang23@outlook.com

个人网站: <https://qiuzu.github.io/qiuzongyang.github.io/>

个人信息

性别: 男 出生年月: 1988 年 籍贯: 福建省 民族: 汉族

工作学习经历

| | | | |
|-----------------|----------|--------|----------------------------|
| 2023.05-至今 | 百图生科(北京) | | 高级算法工程师 |
| 2019.03-2023.04 | 西湖大学 | 计算生物物理 | 助理研究员 博士后 (08/19-08/22) |
| 2011.09-2018.06 | 中国科学技术大学 | 凝聚态物理 | 博士 |
| 2007.09-2011.06 | 福建师范大学 | 物理学 | 学士 |

研究方向和专业技能

研究经历: 在博士期间主要从事材料体系的多尺度模拟, 涉及方法涵盖了 DFT, 经典力场以及动力学蒙特卡洛模拟, 研究材料的生长过程的机理, 并利用增强采样算法计算基元过程的自由能面。在博士后阶段, 主要从事生物体系的分子动力学模拟, 生物大分子对接及亲和力的计算, 以及小分子的极化力场开发和蛋白质力场的优化; 在百图生科工作期间, 从事物理方法的评估及其与 AI 模型结合的探索工作。

熟悉软件: LAMMPS, Charmm, OpenMM, GROMACS, VASP, Gaussian, Material Studio > DFTB+ > CP2K, NWChem; HadDock; 熟悉 Linux;

编程语言: C, Fortran, Python, Shell, C++, 最近开始使用 pytorch

代表性论文 (#为共同第一作者,*为通讯作者)

- [1] S.Wang[#], **Z. Qiu[#]**, ..., Jing Huang*, Xu Li* et al, "AXL is a candidate receptor for SARS-CoV-2 that promotes infection of pulmonary and bronchial epithelial cells", *Cell Res.* 31, 126–140(2021)
- [2] J. Zhang, **Z. Qiu**, ..., Jing Huang*, Zhou Nie* et al, "Scan and Unlock: A programmable DNA molecular automaton for cell-selective activation of ligand-based signaling", *Angew. Chem. Int. Ed.* 60, 6733–6743(2021)
- [3] X. Zeng[#], **Z. Qiu[#]**, Pai Li[#], Zhenyu Li* et al, "Steric Hindrance Effect in High-Temperature Reactions", *CCS Chemistry*, 2, 460-467(2020).
- [4] **Z. Qiu**, Pai Li, Z. Li* and J. Yang, "Atomistic Simulations of Graphene Growth: From Kinetics to Mechanism", *Acc. Chem. Res.* 51, 728-735(2018).
- [5] J. Yang[#], **Z. Qiu[#]**, C. Zhao[#] et al. "In-situ Thermal atomization to Transfer Supported Metal

Nanoparticles to Surface Enriched Ni Single atom catalyst”, *Angew. Chem. Int. Ed.* 57, 14095-14100 (2018)

[6] **Z. Qiu**, S. Li, J. Zhao, Z. Li* and J. Yang, “The Nanoparticle Size Effect in Graphene Cutting: A “Pac-Man” Mechanism”, *Angew. Chem. Int. Ed.* 55, 9918(2016)

科研资助

中国博士后科学基金第 68 批面上资助二等，资助编号：2020M681934

2020 年浙江省博士后科研项目择优资助，资助编号: ZJ2020077

2021 年杭州市高层次人才特殊支持计划培养类人才