

# 魏安璐



个人主页: <https://weianlu.github.io/>

联系电话: +86188-1256-0352 | 电子邮箱: [anlu.wei@manchester.ac.uk](mailto:anlu.wei@manchester.ac.uk)

研究方向: DFT 计算、材料模拟、Python

## 教育背景

曼彻斯特大学 (QS32)	博士研究生   计算化学	2022.09 - 至今
• 全额奖学金, 雅思 7.0		
天津大学 (985)	硕士研究生   化学工程 (推荐免试)	2019.09 - 2022.06
• 绩点: 88.2/100		
中国石油大学 (华东) (211)	学士   化学工程与工艺	2015.09 - 2019.06
• 绩点: 88.8/100, 连续四年排名: 1/28		
海外交流经历		
• 阿联酋哈利法大学 (全奖本科毕设项目)		2019.01 - 2019.07
• 马来西亚石油大学 (全奖海外交流项目)		2017.06 - 2017.08

## 学术成果

- Wei, A.; Kaltsoyannis, N. (2025). Helium Migration in Zirconolite: A Density Functional Theory Investigation. 《Journal of Nuclear Materials》. (JCRQ1)
- Wei, A. et al. (2022). Theoretical Insight into Tuning CO<sub>2</sub> Methanation and Reverse Water Gas Shift Reactions on MoO<sub>x</sub>-modified Ni Catalysts. 《Journal of Physical Chemistry C》. (JCRQ2, 封面文章)
- Zhang, R.; Wei, A. et al. (2021). Tuning Reverse Water Gas Shift and Methanation Reactions during CO<sub>2</sub> Reduction on Ni Catalysts via Surface Modification by MoO<sub>x</sub>. 《Journal of CO<sub>2</sub> Utilization》. (JCRQ1)
- Bahamon, D.; Wei, A. et al. (2021). Effect of Amine Functionalization of MOF Adsorbents for Enhanced CO<sub>2</sub> Capture and Separation: A Molecular Simulation Study. 《Frontiers in Chemistry》. (JCRQ2)

## 科研项目

曼彻斯特大学   导师: Nikolas Kaltsoyannis	博士研究生	2022.09 - 至今
• 课题一: “氦扩散行为的第一性原理研究” (J. Nuclear Materials, 2025)		
• 基于密度泛函理论计算 (DFT/VASP) 建立锆石缺陷模型, 计算不同缺陷类型下氦原子的迁移路径和扩散能垒。进行频率计算, 分析温度、压力条件对迁移行为的影响, 为核废料固化材料的设计提供理论依据。		
• 课题二: “锆石中 Pu 掺杂对氦迁移的调控机制” (在研)		
• 基于 DFT 构建钙、锆、钛空位下的 Pu 掺杂锆石超胞模型, 评估缺陷形成能、局域结构畸变及价态特征; 结合 CI-NEB 方法计算氦迁移路径与能垒, 揭示 Pu 掺杂对氦迁移行为的调控机制。		
天津大学   导师: 葛庆峰	硕士研究生	2019.09 - 2022.06
• 课题一: “MoO <sub>x</sub> -Ni 催化剂 CO <sub>2</sub> 加氢机理研究” (J. Phys. Chem. C, 封面文章)		
• 基于 DFT/VASP 计算 CO <sub>2</sub> 加氢不同反应路径的能垒和反应热力学, 构建反应势能面。自主编写 Python 脚本实现微观动力学建模, 定量分析压强对中间体覆盖率和产物选择性的影响。		
• 课题二: “催化剂表面修饰效应研究” (J. CO <sub>2</sub> Utilization, 2021)		
• 基于 DFT/VASP 计算 CO <sub>2</sub> 在 NiMo 催化剂表面的吸附能; 结合 Bader 电荷及 DOS/PDOS 分析, 揭示表面修饰对 CO <sub>2</sub> 吸附与活化的电子结构调控机制。		
哈利法大学   导师: Lourdes F. Vega	学士	2019.01 - 2019.08
• 项目名称: “胺功能化 MOFs 吸附 CO <sub>2</sub> 性能优化” (Front. Chem., 2021)		
• 利用 LAMMPS 平台开展大规模 GCMC 分子模拟, 系统评估不同胺链长与取代度对 CO <sub>2</sub> 吸附等温线、选择性及循环性能的影响; 筛选出最优功能化方案, 为工业 CO <sub>2</sub> 捕集材料设计提供参数化依据。		
中国科学院生物能源与过程技术研究所   导师: 王宁	本科实习生	2018.06 - 2018.08
• 项目名称: “面向钠离子电池应用的石墨炔材料研究” (国家自然科学基金面上项目)		
• 协助设计石墨炔前体分子用于电化学储能; 负责含炔基小分子的分离与纯化, 确保材料高纯度与结构完整性; 参与组装与测试碱金属电池, 评估其储能性能及循环稳定性。		

## 科研技能

- 高性能计算与系统能力: 多年国家级超算平台使用经验 (Archer2, CSF3/4)、熟练 Linux 系统与 Shell 环境配置、精通 Slurm 作业调度与并行任务管理、具备并行效率优化经验 (CPU scaling、内存管理、I/O 优化)、能独立排查收敛问题与集群运行错误、支持高通量 DFT 自动化计算流程构建
- 量子力学计算: 第一性原理计算 (VASP, Gaussian, CASTEP)、反应机理计算 (NEB/CI-NEB)、电子结构分析 (Bader, DOS/PDOS)、声子谱计算
- 分子模拟: 分子动力学 (LAMMPS)、蒙特卡洛模拟 (GCMC)、表面吸附与反应机理建模
- 编程与数据处理: Python: 自动化计算、数据分析、MATLAB、C++

## 学术会议

- 2025 年：第 30 届稀土元素研究会议 (RERC30)，海报展示，美国 芝加哥
- 2024 年：第 30 届材料化学联盟(MCC)周年会议，海报展示，英国 Daresbury
- 2024 年：第 11 届 f 区元素国际会议(ICFE11)，海报展示，法国 Strasbourg
- 2023 年：第 29 届材料化学联盟(MCC)周年会议，海报展示，英国 Daresbury

## 教学经历

曼彻斯特大学 | 教学助理

2023.09 – 2025.06

- 课程 1: CHEM10600 - **Python** 计算练习
- 设计并实施系统化的 Python 教学课程，教授本科生编程基础及其在化学问题求解中的应用；制定练习题与自动批改脚本，帮助学生掌握数据处理、循环结构与可视化方法。
- 课程 2: CHEM10600 - **Gaussian** 量化化学实验
- 指导本科生使用 Gaussian 和 GaussView 进行量化计算，讲解 Hartree – Fock 方法、分子几何优化与分子性质分析；通过案例教学帮助学生理解化学计算的实际科研应用。

## 荣誉奖励

- 2020 年：天津大学一等学业奖学金
- 2019 年：天津大学特等学业奖学金 (推免研究生)
- 2017 年：国家励志奖学金 (排名前 5%，教育部)
- 2017 年：中国石油大学科技创新奖学金
- 2017 年：全国大学生化工安全设计大赛优秀奖 (教育部)
- 2016 年：中国石油大学一等学业奖学金 (排名前 5%)
- 2016 年：中国石油大学“优秀学生”称号