

曲直

18611820072 | quzhi.quer@pku.edu.cn | 北京



教育经历

北京大学

2015年09月 - 2023年06月

分析化学 博士 化学与分子工程学院

北京大学

2010年09月 - 2014年07月

化学 本科 化学与分子工程学院

科研经历

大体系核磁屏蔽常数量化计算

程序优化 测试

- 传统的量化程序计算核磁屏蔽常数(也即对应于化学位移)耗时久，需要 $O(N^3)$ 以上的计算复杂度，我们利用电子结构的局域性与核磁距的局域性降低其计算复杂度，可将整个分子的核磁屏蔽常数计算复杂度降低至接近线性，并将特定核的核磁屏蔽常数计算降低至亚线性。

SARS主蛋白酶多聚性质研究

分子动力学模拟

- SARS主蛋白酶与当下新冠病毒主蛋白酶有类似的功能与序列信息。之前研究中发现其C端存在独特的结构域交换特性，本研究发现该蛋白C端同时存在淀粉样聚集现象，并结合核磁实验与分子动力学模拟研究二者之间的相关性与差异性。

计算机视觉分析液相电镜下蛋白动态变化（未发表）

程序与算法设计 分子动力学模拟 蛋白表达纯化

- 独立开发实验图像处理与数据分析软件，可利用计算机视觉技术自动定位液相电镜照片中的生物大分子，并结合结构信息与分子模拟定量评估其构象变化。

拟核结合蛋白DNA结合机制研究（部分未发表）

分子动力学模拟 分析程序设计 生化实验

- 结合分子动力学模拟与实验表征发现目标蛋白新的DNA结合方式
- 引入增强抽样方法，并独立开发分析程序定量分析蛋白-DNA结合过程动态变化

专业技能

- 专业知识：高中曾获得全国化学竞赛金牌，化学基础扎实，且熟练掌握量子物理、统计物理、结构生物学、计算机视觉、机器学习等多学科知识。
- 计算机语言：熟练掌握Python与NumPy、OpenCV、PyTorch、Matplotlib等模块。熟悉Fortran、C++等语言。
- 相关软件：扎实掌握分子动力学模拟与量子化学计算的原理与流程，可熟练使用Amber、Gromacs、Gaussian、Cafemol、BDF等软件。
- 湿实验技能：熟练掌握蛋白表达纯化表征技术，熟悉核磁结构解析流程。
- 办公技能：可熟练使用Office办公软件与Origin、AI、PS等作图软件，熟悉Linux系统。
- 英语能力：可满足学术交流以及文献阅读与写作要求。