

杜鹏理

性别：男

出生：1991年11月6日

邮箱：dupl@mail.ustc.edu.cn

URL：<http://home.ustc.edu.cn/~dupl/>

民族：汉

籍贯：甘肃省天水市

手机：18856034388



教育经历

本科生学校：兰州大学(2010/09—2014/06)

院系：化学化工学院

专业：化学基地班

学位：学士



研究生学校：中国科学技术大学(2014/09—2021/06)

院系：合肥微尺度物质科学国家研究中心

专业：物理化学

学位：博士



本科生阶段成绩单

• 部分主要专业必修课成绩：

无机化学(上) **92.0** 无机化学(下) **93.0**

有机化学(上) **96.0** 有机化学(下) **99.0**

物理化学(上) **90.0** 物理化学(下) **97.0**

分析化学 **87.0** 仪器分析 **88.0**

结构化学 **92.0** 高分子基础 **98.0**

生物化学 **88.0** 化工基础 **81.0**

研究生阶段发表论文

• 第一作者发表学术论文：

1. “System-Bath Entanglement Theorem with Gaussian Environment”, Peng-Li Du#, Yao Wang#, Rui-Xue Xu*, Hou-Dao Zhang, and YiJing Yan, *J. Chem. Phys.*, **2020**, 152(3): 034102.

2. “Nonequilibrium system–bath entanglement theorem versus heat transport”, Peng-Li Du#, Zi-Hao Chen#, Yu Su, Yao Wang*, Rui-Xue Xu, and YiJing Yan*, *Chem. J. Chinese Universities*, **2021**, 42(7): 2155-2160.

- 非第一作者发表学术论文：
 1. “Improving the Performance of Long-Range-Corrected Exchange-Correlation Functional with an Embedded Neural Network”, Qin Liu, JingChun Wang, **PengLi Du**, LiHong Hu, Xiao Zheng*, and GuanHua Chen, *J. Phys. Chem. A*, **2017**, 121(38): 7273-7281.

博士学位论文与研究成果

- 体系-环境纠缠的光吸收谱与热涨落谱

该论文的研究方向为开放量子体系的基础理论和方法，主要取得了如下创新性成果：

1. 推导建立 Gauss 型热库情形下的体系-环境纠缠定理。该定理表明，对于与 Gauss 型环境耦合的任意体系，在已知环境谱密度情况下，可以将体系-环境纠缠的响应函数与体系的局域响应函数联系起来。通过该定理，仅关注体系的量子耗散动力学方法，比如量子主方程理论等，现在也可以方便的获得体系-环境纠缠的动力学性质。因而，对实际开放量子体系的模拟研究和展新型半经典分子动力学方法有着重要的意义。

2. 推广单热库耗散子方程组方法应用到不同温度多热库的热输运体系，并利用耗散子相空间代数，建立了模拟量子热输运中热流和热涨落谱的一般方法，为研究介观体系的动力学和热力学提供参考。

获奖情况

- 高中生阶段：全国高中学生化学竞赛甘肃赛区预赛二等奖
全国高中数学联合竞赛优胜奖
- 本科生期间：兰州大学优秀学生三等奖学金
- 研究生期间：合肥微尺度物质科学国家研究中心一等奖学金
中国科学技术大学一等学业奖学金

计算机水平

- 全国计算机等级考试二级 C 成绩合格。
- 熟练使用 C、C++、Fortran、Python、Matlab、Mathematica、Bash 等科学计算和脚本语言。
- 熟练掌握 Office，Origin 等日常办公软件。
- 熟练使用 vim 和 vscode 等文本编辑器。
- 熟悉 Linux 系统的管理与维护，包括系统、软件环境的安装和部署等。
- 熟悉计算化学软件：Gaussian，VASP 以及课题组开发的 MOSCAL 等。

项目经历

- MOSCAL (Multiscale-Oriented Spectroscopy CALculator)

本人参与了课题组 MOSCAL 的开发。MOSCAL (Multiscale-Oriented Spectroscopy CALculator, 面向多尺度的谱学计算模拟程序) 是一款基于量子耗散理论的光谱学模拟软件, 能够对凝聚相化学物理体系和生物大分子体系的线性与非线性光谱等进行精确且高效的数值模拟。

MOSCAL 是基于 DEOM (Dissipation-equation-of-motion, 耗散子运动方程) 的数值模拟程序。DEOM 是一类对 Gauss 型环境而言在数值上严格的量子耗散理论, 它不仅描述了体系自身的动力学性质, 还可以用来描述体系-环境的纠缠动力学性质。利用耗散子动力学空间的量子力学代数, DEOM 可以被用来模拟各种类型的光谱, 包括光响应谱、光吸收谱、二维光谱等等。因此, MOSCAL 不仅可以用来模拟体系自身的各种动力学和谱学性质, 还可以用来模拟体系-环境的纠缠动力学和谱学性质。

MOSCAL 的功能是在一定的输入参数下, 模拟相应体系以及环境的各种光谱性质。MOSCAL 利用了多种高效的数值方法来保证模拟的精确性和高效性, 包括 Padé 谱展开方法、有效过滤算法等等。

自我评价

- 在基础理论知识方面有扎实的基本功, 本科生阶段所修专业课程均取得优异成绩, 尤其是无机化学和有机化学等课程, 研究生阶段所修专业课程均为优秀或良好。
- 本人对化学, 数学, 物理以及计算机都有较好的掌握。
- 工作认真负责, 积极主动, 能吃苦耐劳。具有较强的适应能力和自学能力。思维敏捷, 有较强的动手实践能力和团体协作精神。
- 掌握写作、计算机、英文阅读等技能。

今后工作设想

- 教学方面: 从事无机化学、有机化学或结构化学的教学。
- 科研方面: 在化学前沿领域做一些科学研究。