|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **中国科学院大连化学物理研究所应聘人员登记表** | | | | |
| **申报部门** | 1106 | **申报岗位** | 生物酶催化反应机理研究 | http://www.zp.dicp.ac.cn/zp_upimg/1482638956.jpg |
| **姓名** | 李文金 | **岗位类别** | 科技 |
| **婚姻状况** | 已婚 | **性别** | 男 |
| **出生日期** | 1981-03-01 | **民族** | 汉 |
| **政治面貌** | 群众 | **户口所在地** | 湖北省天门市皂市镇 |
| **毕业时间** |  | **学历/学位** | 研究生/博士 |
| **毕业学校及专业** | 中科院上海生命科学院计算生物学所计算生物学专业 | | | |
| **工作单位及职务** | 伊利诺伊大学芝加哥分校博士后 | | | |
| **是否有亲属在所内工作或学习** | 无 | | | |
| **联系方式** | **手机：**+13128045473  **固话：**+13128045473 | | | |
| **信箱：**wenjin@uic.edu | | | |
| **学习及工作经历：**   |  | | --- | | 1996.9-2000.7, 湖北省天门市胡市高级中学 2000.9-2004.7, 浙江大学材料与化学工程学院，生物工程专业，学士学位 2004.8-2005.11, 宁波丽阳化纤有限公司，技术员 2005.12-2007.8, 离职并复习考研 2007.9-2012.7, 中科院上海生命科学院计算生物学所，计算生物学，博士学位 2009.11-2010.10, 德国海德堡理论研究所，中欧联合培养博士生 2010.11-2011.12, 德国马普生物物理化学研究所，中欧联合培养博士生 2012.7-2012.10, 博士毕业短期留原课题组 2012.10-2013.2, 德国海德堡理论研究所, 博士后 2013.3至今, 伊利诺伊大学芝加哥分校，博士后 | | | | | |
| **主要经验及业绩：**   |  | | --- | | 我的研究兴趣主要是利用理论计算模拟方法研究生物酶催化反应机理，以及与之相关的计算方法的开发。研究过的酶催化反应包括：有机分子催化蛋白质内二硫键的交换反应（该成果发表在JACS上），与调节体内氧化还原势能相关的酶催化的二硫键还原反应，以及Ras/RasGAP催化的GTP水解反应。  另外，我在计算模拟方法上的理论知识和经验丰富，并已开发了多个方法，包括增强采样的方法，计算自由能的方法和寻找反应坐标的方法。  同时，我能熟练运用和修改分子模拟软件GROMACS，掌握QM/MM和MM模拟方法，能够采用各种立场（CHARMM，AMBER, OPLS-AA等）对各种生物大分子系统（在水溶液和/或膜环境中）进行模拟。  此外，我有很强的编程能力（特别是C/C++），已将多个方法（包括已有的和我自己开发的）写进GROMACS里。我也熟练掌握Bash脚本和R等常用编程语言。  至今已发表第一作者的SCI文章10篇，其中在近五年发表的有8篇（参见后面的发表文章列表），和专著章节一篇。  所发表第一作者文章列表： 1. Li W, and Ma A. A Benchmark for Reaction Coordinates in the Transition Path Ensemble. J. Chem. Phys. 144(13), 134104 (2016). (SCI, 影响因子: 2.894) 2. Li W, and Ma A. Reaction Mechanism and Reaction Coordinates from the Viewpoint of Energy Flow. J. Chem. Phys. 144(11), 114103 (2016). (SCI, 影响因子: 2.894) 3. Li W, and Ma A. Some Studies on Generalized Coordinate Sets for Polyatomic Molecules. J. Chem. Phys. 143 (22), 224103 (2015). (SCI, 影响因子: 2.894) 4. Li W, and Ma A. Reducing the Cost of Evaluating the Committor by a Fitting Procedure. J. Chem. Phys. 143 (17), 174103 (2015). (SCI, 影响因子: 2.894) 5. Li W, Baldus I, and Graeter F. Redox Potentials of Disulfide Bonds in Proteins Estimated from Free Energy Calculations. J. Phys. Chem. B 119 (17), 5386-5391 (2015). (SCI, 影响因子: 3.187) 6. Li W, and Ma A. Recent Developments in Methods for Identifying Reaction Coordinates. Mol. Simulat. 40 (10-11), 784–793 (2014) (SCI, 影响因子: 1.20) 7. Li W, Edwards SA, Lu L, Kubar T, Patil SP, Grubmueller H, Groenhof G, and Graeter F. Force Distribution Analysis of Mechanochemically Reactive Dimethylcyclobutene. ChemPhysChem 14 (12), 2687-2697 (2013) (SCI, 影响因子: 3.138) 8. Li W, Rudack T, Gerwert K, Graeter F, and Schlitter J. Exploring the Multi-Dimensional Free Energy Surface of Phosphoester Hydrolysis with Constrained QM/MM Dynamics. J. Chem. Theor. Comput. 8 (10), 3596-3604 (2012) (SCI, 影响因子: 5.301) 9. Li W, and Graeter F. Atomistic Evidence of How Force Dynamically Regulates Thiol/Disulfide Exchange. J. Am. Chem. Soc. 132 (47), 16790-16795 (2010) (SCI, 影响因子: 13.038) 10. Li W, Lin K, Feng K, and Cai Y. Prediction of Protein Structural Classes Using Hybrid Properties. Molec. Divers. 12, 171-179 (2008) (SCI, 影响因子: 1.896)  专著章节： Graeter F, and Li W. Transition Path Sampling with Quantum/Classical Mechanics for Reaction Rates. In: Kukol A (ed) Molecular Modelling of Proteins, 2nd edition. Springer, New York. 2015. | | | | | |