

# 王美洁

133-8653-5855

wangmeijie@stu.xmu.edu.cn

https://migie.top

## 教育经历

- 厦门大学 | 凝聚态物理 | 硕博连读 2022.09 – 至今
- 导师: 曹昕睿 (副教授) 研究方向: 计算材料、单双原子催化剂设计
- 杭州师范大学 | 物理学 | 理学学士 2018.09 – 2022.06

## 专业技能

- AI & 机器学习:
  - 熟练调用 GNN (CHGNet, Open Catalyst Project) 预训练模型进行材料筛选。
  - 熟练运用 GBR (Gradient Boosting Regressor)、PCA、交叉验证及特征工程 (Scikit-learn)。
- 编程与开发:
  - Python: 熟练运用 ASE, Pymatgen 进行高通量建模; 熟练运用 Pandas, NumPy 进行数据分析; 熟练运用 Matplotlib 进行科研绘图。
  - 工具: Linux Shell 自动化脚本, HPC 集群作业调度。
- 科学计算: VASP 使用经验 (电子结构分析, 能带, 态密度, 反应路径计算)。
- 语言: 英语 (流利读写, 以第一作者发表多篇 SCI 论文)。

## 项目经历

- 基于 Open Catalyst Project (OCP) 的催化剂高通量筛选 workflow 2024.10 – 至今  
数据流程搭建 Python / Materials Project / OCP 厦门大学
- 自动化构型生成: 编写脚本调用 MP API 爬取全量 Si-TM 二元晶体, 利用 OCP 工具包自动切面并生成所有不等价吸附构型。
  - 结构筛选: 部署 OCP 官方 EquiformerV2 预训练势函数进行结构弛豫, 替代 DFT 完成海量构型快速初筛。
- 物理特征驱动的机器学习模型开发与描述符构建 2023.06 – 2025.12  
机器学习应用 / 特征工程 / 物理建模 Scikit-learn / GBR / PCA 厦门大学
- ML 模型训练与应用 (JMCA): 针对双原子催化剂构建 GBR 预测模型; 实施特征清洗及 5-fold CV 交叉验证, 成功加速高活性催化剂发现。
  - 描述符推导与降维: 提出通用曲率描述符解决传统几何指纹失效问题; 编写脚本利用 PCA 处理高维波函数数据, 验证了曲率对电子结构的调控机制。
- 基于神经网络算法的液体光谱识别系统 2020.06 – 2020.11  
底层算法实现 / 独立开发 杭州师范大学
- 零框架实现: 深入理解算法原理, 基于 NumPy 独立手写实现了多层感知机 (MLP) 的完整训练逻辑。
  - 核心模块开发: 独立实现了矩阵乘法、激活函数及核心的与梯度下降算法, 并成功获得专利授权。

## 精选学术成果

- Meijie Wang et al. A geometric-electronic principle for curvature-driven catalysis. *J. Am. Chem. Soc.* (In Peer Review).
- Meijie Wang et al. p-d Orbital coupling in silicon-based dual-atom catalysts for enhanced CO<sub>2</sub> reduction: insight into electron regulation of active center and coordination atoms. *J. Mater. Chem. A*, 12(46), 31902–31913 (2024). [DOI]
- Meijie Wang et al. Curvature engineering of SiFe dual-atom catalysts for enhanced CO<sub>2</sub> electroreduction. *J. Phys. Chem. Lett.* (In Peer Review).
- Meijie Wang et al. SiFeN<sub>6</sub>-graphene: a promising dual-atom catalyst for enhanced CO<sub>2</sub>-to-CH<sub>4</sub> conversion. *Appl. Surf. Sci.*, 643, 158724 (2024). [DOI]
- 王美洁等. 一种液体检测装置. 中国发明专利, ZL 20211 0042048.9, 授权日: 2024.05.