

姓名：王凡

地址：LG2A, CNRS FRE 3517, UFR de Pharmacie, Université de Picardie Jules Verne
1, rue des Louvels, 80036 Amiens Cedex, 法国

性别：男 民族：汉 1986 年 8 月出生

邮箱：fan.wang@u-picardie.fr
fan.wang@q4md-forcefieldtools.org

网站：<http://q4md-forcefieldtools.org/FW>

现状

q4md-forcefieldtools 项目助理研究员

正在寻找大学或者科研机构的职位(在计算化学,生物信息学,科学计算领域)

教育背景

- | | |
|--------|---|
| 2014 年 | 计算化学 博士 - 于勒•凡尔纳-庇卡底大学, 亚眠, 法国 |
| 10 月 | 博士论文课题：分子动力学应用软件的开发以及运用分子动力学研究生物无机复合物的结构 |
| | 论文下载地址： http://q4md-forcefieldtools.org/FW/Thesis |
| | Ph.D. in Computational Chemistry |
| | Title: Software developments and structural studies of bioinorganic complexes by molecular dynamics |
| | Manuscript: http://q4md-forcefieldtools.org/FW/Thesis |
| | Université de Picardie Jules Verne, Amiens, France |
| 2010 | 计算机科学与技术 硕士 - 于勒•凡尔纳-庇卡底大学, 亚眠, 法国 |
| | Université de Picardie - Jules Verne, Amiens, France |
| 2008 | 计算机科学与技术 学士 - 于勒•凡尔纳-庇卡底大学, 亚眠, 法国 |
| | Université de Picardie - Jules Verne, Amiens, France |
| 2007 | 数学 学士 - 于勒•凡尔纳-庇卡底大学, 亚眠, 法国 |
| | Université de Picardie - Jules Verne, Amiens, France |
| 2005 | 数学 本科一年级 - 华中科技大学, 武汉, 中国 |
| | Huazhong University of Science and Technology, WuHan, China |

技能和实践

计算化学以及分子模拟相关的应用程序:

- 开发分子动力学应用程序 PyRED (或 R.E.D. Python, 使用 Python 编程语言) 和 R.E.D. Server Development tools (<http://q4md-forcefieldtools.org/REDServer-Development>) 应用于力场的生成 (AMBER 和 GLYCAM 力场)
- 优化和改进分子动力学应用程序 R.E.D. IV (使用 Perl 编程语言)
- 使用 pmemd 和 sander 应用程序进行分子动力学模拟 (AMBER)
- 数据可视化 (VMD, GaussView, Avogadro, PyMol)
- 量子化学 (Gaussian, GAMESS, Firefly)
- 其它：Babel, Bkchem

程序开发和操作系统:

- 编程语言: Python, Perl, C/C++, Fortran, Java
- 网页程序设计: XHTML, PHP, JavaScript, MySQL, CSS
- 数学应用程序: Matlab, Scilab
- MPI 和 OpenMP 并行计算编程
- Shell 程序 (tcsh, bash, sed, awk)
- 安装和管理 Linux 工作站和计算机集群 (管理, 程序安装和编译, PBS 批处理系统)

语言

中文 母语

法语 通顺地书面表达, 流利地进行日常交流

英语 通顺地书面表达, 流利地进行日常交流

科研经验

2011 年 10 月 - 2014 年 11 月

法国国家科学研究中心 FRE 3517, 糖化学和抗菌剂以及农业资源实验室; 药剂学院, 于勒·凡尔纳-庇卡底大学, 亚眠, 法国

博士研究生, 导师: François-Yves Dupradeau 教授

- 项目: 分子动力学应用软件的开发以及运用分子动力学研究生物无机复合物的结构
- 该项目是法国于勒·凡尔纳-庇卡底大学和美国 Sanford-Burnham 医学研究院(圣地亚哥)的国际合作项目
- 获得法国庇卡底大区委员会和欧洲区域发展基金的奖学金

2010 年 1 月 - 2010 年 8 月

Doonya Technologies, 里尔, 法国; 于勒·凡尔纳-庇卡底大学, 亚眠, 法国

硕士研究生, 导师: Anne. Lapujade 教授

- 项目: 开发应用程序 WebConf, 应用于控制基于网际协议通话技术的会议(VOIP Asterisk, QoS, PHP, Javascript, C/C++, Linux shell)

文章

- *Object oriented programming for Amber force fields: application to the study of bioinorganic complexes by molecular dynamics simulation*
F. Wang, J.-P. Becker, P. Cieplak, F.-Y. Dupradeau, in preparation.
- *β -hematin crystal formation: first insights from molecular dynamics of small clusters in water*
J.-P. Becker, F. Wang, P. Sonnet, F.-Y. Dupradeau, J. Am. Chem. Soc. submitted Jul 28, 2015.

- *Effects of Hypoxanthine Substitution in Peptide Nucleic Acids Targeting KRAS2 Oncogenic mRNA Molecules: Theory and Experiment*
J. M. Sanders, M. E. Wampole, C.-P. Chen, D. Sethi, A. Singh, F.-Y. Dupradeau, F. Wang, B. D. Gray, M. L. Thakur & E. Wickstrom, *J. Phys. Chem. B* **2013**, **117**, 11584-11595.

会议

- *R.E.D. Python: Object oriented programming for Amber force fields*
F. Wang, J.-P. Becker, P. Cieplak, F.-Y. Dupradeau, 247th American Chemical Society national meeting, Dallas, TX, March 16-20, 2014
- *R.E.D. Python: Application of object oriented programming to charge derivation and force field library building for the Amber additive and non-additive force field models*
F. Wang, J.-P. Becker, P. Cieplak, F.-Y. Dupradeau, GGMM 2013 meeting (Groupe Graphisme et Modélisation Moléculaire), Ile d'Oléron, May 21 – 23, 2013.

程序, 网络服务和指导书

- *R.E.D. Server Development - Performing calculations with the PyRED program : Application to charge derivation, force field library building and force field parameter generation*
Fan Wang, [1] Jean-Paul Becker, [1] Piotr Cieplak, [2] François-Yves Dupradeau [1] FRE CNRS 3517 & UFR de Pharmacie, Université de Picardie - Jules Verne, rue des Louvels, Amiens, France
[2] Sanford | Burnham Medical Research Institute, 10901 North Torrey Pines Road, La Jolla, CA 92037, USA
<http://q4md-forcefieldtools.org/Tutorial/Tutorial-4.php>
<http://q4md-forcefieldtools.org/REDServer-Development>

参考

- **F.-Y. Dupradeau** 教授; 法国国家科学研究中心 FRE 3517, 药剂学院, 于勒•凡尔纳-庇卡底大学, 亚眠, 法国
邮箱: fyd@u-picardie.fr, 电话: +33-3-2282-7498
- **Piotr Cieplak** 教授; Sanford-Burnham 医学研究院, 圣地亚哥, 美国
邮箱: pcieplak@sanfordburnham.org, 电话: +1-858-646-3100 x 3076
- **Yu Li** 教授; 数学和计算机学院, 于勒•凡尔纳-庇卡底大学, 亚眠, 法国
邮箱: yu.li@u-picardie.fr, 电话: +33-3-2282-7872