


## 山西煤化所博士后/特别研究助理岗位申请表

基本信息	姓名	雷庭俞	出生年月	1990 年 10 月		
	性别	男	政治面貌	中共党员		
	现工作单位/ 部门	北京化工大学		现专业技术 职务	应届博士 毕业生	
	申请合作 导师	温晓东	刘星辰			
	联系电话及 邮箱	略				
	博士毕业 院校	北京化工大学		专业	化学工程与技术	
	户口所在地	北京市朝阳区北京化工大学		婚姻状况	已婚	
学习 简历 (从 高中 起)	起止年月	院校/专业		学历/学位		
	2006.9~ 2009.6	山西省太原市成成中学		高中		
	2009.9~ 2013.7	五邑大学	化学工程与工艺专业	大学本科/学士		
	2014.9~ 2017.6	北京化工大学	化学工程与技术专业	研究生/硕士		
	2017.9~ 2021.6	北京化工大学	化学工程与技术专业	研究生/博士		
工作 简历 (时 间 连 续)	起止年月	单位/职务				
	无	无				

## 过去的研究工作及成果概述

本人硕士期间从事烟气 SCR 脱硝催化剂的相关研究，包括钒钛基 SCR 催化剂的碱金属中毒机理、废弃钒钛基 SCR 催化剂资源化回收以及铜铝基 SCR 催化剂脱硝机理的分子模拟研究。其中钒钛 SCR 催化剂的碱金属中毒机理部分发表在国际期刊 *Chemical Engineering Journal* 上。

博士期间从事碳基资源催化转化的理论计算工作。包括一套多相催化的原位动态模拟方案：采用从头算原子热力学研究原位条件下催化剂形貌的变化；通过 DFTB-NMD 方法研究原位条件下的催化反应网络，提取其中关键反应；通过 DFT 方法计算关键反应的反应能垒，并通过微观动力学与实验宏观结果进行对比。具体成果如下：

1. 采用从头算原子热力学及经典分子动力学方法，研究反应条件下 Ni 催化剂的积碳行为及原位形貌演化规律，该部分发表在 *The Journal of Physical Chemistry C*。

2. 开发了一种加速的从头算分子动力学方法：基于 DFTB 的纳米反应器分子动力学 DFTB-NMD 方法，并以乙炔爆轰法制备石墨烯为例验证了该模拟方法对复杂反应过程的适用性，该部分发表在 *Journal of Chemical Theory and Computation*。

3. 采用 DFTB-NMD 研究 Fe 团簇上碳沉积及碳加氢过程的反应机理及反应网络，该部分目前正在撰写论文。

## 主要发表的文章和专利

作者（全部），题目，杂志名称，卷、期、页码，月，年

1. **Tingyu Lei**, Qichao Li, Sifan Chen, Zhenyu Liu, and Qingya Liu\*. KCl-induced deactivation of  $V_2O_5-WO_3/TiO_2$  catalyst during selective catalytic reduction of NO by  $NH_3$ : Comparison of poisoning methods, *Chem. Eng. J.*, 296: 1-10, March, 2016.
2. **Tingyu Lei**, Wenping Guo, Qingya Liu, Haijun Jiao, Dong-Bo Cao, Botao Teng, Yong-Wang Li, Xingchen Liu\*, and Xiao-Dong Wen\*. Mechanism of Graphene Formation via Detonation Synthesis: A DFTB Nanoreactor Approach. *J. Chem. Theory Comput.*, 15(6): 3654-3665, May, 2019.
3. **Tingyu Lei**, Jiatian Mao, Xingchen Liu,\* Amar Deep Pathak, Sharan Shetty, Alexander P. van Bavel, Lu Xie, Rui Gao, Pengju Ren, Dan Luo, Qingya Liu, Wei Ma, Chuanlai Xu\*, and Xiaodong Wen\*. Carbon Deposition and Permeation on Nickel Surfaces in Operando Conditions: a Theoretical Study. *J. Phys. Chem. C*, 125(13): 7166-77, March, 2021.

### 已承担项目

注明项目名称、项目来源、项目经费、项目起讫时间以及候选人作为项目完成人的排名

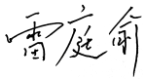
无

### 所获奖励情况

奖励名称、等级、授予单位和年份

研究生国家奖学金 国家级 中华人民共和国教育部 2016 年

本人保证以上内容真实、可靠。

申请人签字：

日期：2021. 4. 25