

汤缪炅

杭州 | ✉ mj_t@zju.edu.cn | ☎ (+86)136-5663-9176
政治面貌：中共党员 | 📄 英语水平：CET-6
化学硕博连读研究生 · 浙江大学化学系 · 数据驱动化学 / 化学人工智能



浙江大学化学系硕博连读，研究方向为数据驱动的有机合成反应建模和计算加速。围绕不对称催化反应建模、分子与反应数据基础设施、量子化学计算和图表示学习开展研究；以第一作者发表 Angew. Chem., Int. Ed., Sci. Data, Chem. Asian J. 论文，并参与 Nat. Mach. Intell. 反应预训练框架工作。

教育经历

浙江大学 · 化学，硕博连读

2022.09 - 预计 2027.06

化学系 | 研究方向：数据驱动的有机合成反应建模和计算加速 | 导师：洪鑫教授

杭州

- 聚焦“量子化学计算-数据构建-模型学习-反应应用”的闭环研究，面向不对称催化、分子性质和反应性能预测建立数据与模型方法。

浙江大学 · 化学，本科

2018.09 - 2022.06

竺可桢学院求是化学班 | GPA 3.77/4.0 | 导师：洪鑫教授 | 科学计算方向训练

杭州

- 完成化学、编程、科学计算和机器学习相关训练，早期工作聚焦分子描述符、谱图表征和反应性能预测。

奖项与资助

2026 研究生	浙江大学博士研究生求是新星培养计划资助项目	资助
	浙江大学优秀研究生；新和成创新奖学金	奖项
本科	浙江大学校优秀毕业生；浙江大学校级优秀团员；美国大学生数学建模竞赛 Meritorious Winner 两次	奖项
本科	学业奖学金（二等一次、三等两次）；竺可桢学院拔尖学生奖学金；省级大学生科研训练计划项目；全国大学生化学实验创新设计大赛三等奖	奖学金

实习经历

复旦青浦未来技术研究院

2026.07 - 至今

研究实习生

- 负责拓扑反应过渡态生成算法设计，并优化基于 Ascend 平台的训练和推理。

上海科学智能研究院 · 物质科学部门

2024.07 - 2025.03

算法实习生

- 负责虚构反应生成算法设计，支持反应嵌入、产率/选择性预测和合成规划。

项目经历

MolGR 分子图重建工具

2025.12 - 至今

XYZ 坐标到 RDKit 分子图的高性能重建 Python 包

负责人

- 开发基于 C++/Python 的 XYZ-RDKit 分子图重建工具，支持键级、三维构象、可选配位键和立体化学信息；优化候选态枚举、评分和后处理，实现毫秒级重建并改善金属与自旋体系处理。

N,N'-dioxide/金属催化不对称 Michael 加成数据与建模平台

2024.10 - 2025.08

一作论文：Angew. Chem., Int. Ed. 2026

一作 / 负责人

- 整理 N,N'-dioxide/金属催化 Michael 加成反应数据，建立机理感知图神经网络与相似性加权外推流程，用于催化剂选择和选择性预测。

高效分子计算日志数据提取工具 MolOP

2023.10 - 至今

计算化学数据解析与自动化工具

负责人

- 开发类型友好、带数值量纲、支持并行处理的分子计算日志解析与数据引擎，为量子化学数据生产和自动化流程提供工程基础。

天池首届世界科学智能大赛：分子属性预测竞赛

2023.08 - 2023.10

千万量级有机小分子量子化学能量与受力预测任务

队员

- 使用图神经网络模型预测有机小分子的量子化学能量与受力，并围绕模型架构和训练策略进行优化。

QM9star 分子数据集与 qm9star_query 查询平台

2023.03 - 2024.06

一作论文：Sci. Data 2024

一作 / 负责人

- 面向离子、自由基和中性分子构建 DFT 优化结构数据集，并开发数据库查询、API 服务、图神经网络示例和教程。

基于谱图的分子表征与反应性能预测

2022.04 - 2023.02

一作论文：Chem. Asian J. 2023

一作 / 负责人

- 使用图像识别解析分子 NMR 光谱图像，将谱图向量用于反应性能预测，验证谱图启发描述符的分子表征能力。



专业技能

- 机器学习：** 熟练使用 Python 进行科研数据挖掘、脚本开发和模型实验；熟悉监督学习、图神经网络、Transformer/预训练模型及图像处理流程，能够基于 sklearn、PyTorch、OpenCV 等完成分子性质、反应选择性、合成规划和谱图表征任务。
- 计算化学：** 掌握 Gaussian、xTB 等量子化学和半经验计算工具的使用，能够结合 Python 脚本与计算软件开展反应机理计算、批量结构优化、日志解析和数据生产；理解电子结构、过渡态、原子/键级性质与三维构象在分子表征和模型解释中的作用。
- 昇腾平台与算子优化：** 具备华为昇腾（Ascend）平台使用和算子优化经验，能够开展模型部署与性能分析，定位性能瓶颈，并针对算子实现和数据流进行优化。
- 化学信息学：** 熟悉 RDKit、OpenBabel 等分子工具包的使用和深度二次开发，具备从 XYZ/SMILES、计算日志、文献反应、谱图图像和量子化学结果构建分子与反应数据基础设施的经验。
- 科研工程：** 具备化学数据库、API 服务、命令行工具和可复现数据管线开发经验；熟悉后端开发、Linux、CI/CD、容器和虚拟化运维，能够将算法原型整理为可维护的科研软件与自动化工作流。
- GitHub：** <https://github.com/gentle1999>
- Google Scholar：** https://scholar.google.com/citations?user=86_ftaAAAAAJ
- ORCID：** <https://orcid.org/0000-0003-2075-366X>

科研成果

目前以第一作者发表 SCI 论文 3 篇，另合作发表论文 8 篇。以下按代表性工作优先列出。

- Tang, M.-J.; Zhang, T.; Huang, Q.; Li, S.; Liu, R.; Li, H.; Chen, X.; Dong, S.; Liu, X.; Feng, X.; Hong, X. Data - Driven Modeling of N,N' - Dioxide/Metal - Catalyzed Asymmetric Michael Additions. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2026**, 65(12), e18560. DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.202518560> (2024 JIF: 17.0)
- Tang, M.-J.; Zhu, T.-C.; Zhang, S.-Q.; Hong, X. QM9star, two Million DFT-computed Equilibrium Structures for Ions and Radicals with Atomic Information. *Sci. Data* **2024**, 11(1), 1158. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41597-024-03933-6> (2024 JIF: 6.9)
- Tang, M.-J.; Xu, L.-C.; Zhang, S.-Q.; Hong, X. Exploring Spectrum - based Molecular Descriptors for Reaction Performance Prediction. *Chem. Asian J.* **2023**, 18(7), e202300011. DOI: <https://doi.org/10.1002/asia.202300011> (2024 JIF: 3.3)
- Xu, L.-C.; Tang, M.-J.; An, J.; Cao, F.; Qi, Y. A unified pre-trained deep learning framework for cross-task reaction performance prediction and synthesis planning. *Nat. Mach. Intell.* **2025**, 7(9), 1561-1571. DOI: <https://doi.org/10.1038/s42256-025-01098-4> (2024 JIF: 23.9)
- Xu, G.-X.; Liu, J.-R.; Gao, Z.; Tang, M.-J.; Sun, Y.-Z.; Li, Z.-L.; Liu, X.-Y.; Zhang, S.-Q.; Hong, X. Unveiling mechanistic patterns of copper-catalyzed radical bond formation through linear free energy relationship. *Nat. Commun.* **2025**, 17(1), 1027. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-025-67770-w> (2024 JIF: 15.7)
- Xu, L.-C.; Zhang, S.-Q.; Li, X.; Tang, M.-J.; Xie, P.-P.; Hong, X. Towards Data - Driven Design of Asymmetric Hydrogenation of Olefins: Database and Hierarchical Learning. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2021**, 60(42), 22804-22811. DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.202106880> (2024 JIF: 17.0)
- Xu, L.-C.; Zhu, D.-X.; Tang, M.-J.; Liu, T.-T.; Liu, Y.-Z.; Ma, C.-H.; Li, Z.-X.; Zhang, S.-Q.; Hong, X. Transforming Molecular Synthesis With Large Language Models. *Chem. Eur. J.* **2026**, 32(31), e71074. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.71074> (2024 JIF: 3.7)
- Wang, X.; Tang, M.-J.; Yang, Z.; Xiong, A.; Hong, X.; Feng, X.; Liu, X. Asymmetric Desymmetrization of para - Quinamines via (3+2) Cycloaddition With 1,3,5 - Triazines. *Chem. Eur. J.* **2026**, 32(36), e71220. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.71220> (2024 JIF: 3.7)
- Chen, Z.; Tang, M.; Chen, X.; Ding, D.; Gao, J.-K.; She, Y.; Yang, Y.-F. Using machine learning methods to predict the diabatic bond dissociation energy of non-heme iron complexes. *Org. Biomol. Chem.* **2025**, 23(19), 4758-4767. DOI: <https://doi.org/10.1039/d5ob00007f> (2024 JIF: 2.8)
- Sun, Y.-Z.; Tang, M.-J.; Zhang, S.; Hong, X. 数据驱动的有机分子理化性质预测. *Chin. Sci. Bull.* **2024**, 70(4-5), 492-507. DOI: <https://doi.org/10.1360/tb-2024-0812> (2024 JIF: 1.2)
- Zhang, S.-Q.; Hong, X.; Xu, L.-C.; Li, X.; Tang, M.-J.; Yuan, L.-T.; Zheng, J.-Y. A Molecular Stereostructure Descriptor Based On Spherical Projection. *Synlett* **2021**, 32(18), 1837-1842. DOI: <https://doi.org/10.1055/s-0040-1705977> (2024 JIF: 1.4)