

姓名	冯华杰	
出生年月	1981年10月	
职称	副教授	
学历（学位）	博士	
导师类别	学术型硕士生导师/专业硕士指导教师	
研究方向	理论与计算化学	
招生专业	化学、学科教学（化学）	
联系方式	18876088586, hopejay@163.com	

### 1、工作与教育经历

2017-09 至 2018-06, 北京大学, 化学与分子工程学院, 访问学者

2013-12 至今, 海南师范大学, 化学与化工学院, 副教授

2011-06 至 2013-12, 海南师范大学, 化学与化工学院, 讲师

2006-09 至 2011-06, 中山大学, 化学与化学工程学院, 硕博连读, 导师: 陈六平

2000-09 至 2005-06, 中山大学, 化学与化学工程学院, 本科, 主修化学, 辅修计算机科学与技术

### 2、主要研究方向

流体的扩散与局部结构、电池与电容器、有机化合物的结构与光谱、生物医药等领域的分子动力学模拟与量化计算

### 3、承担科研项目

(1) 国家自然科学基金地区基金项目, 22063003, 二氧化碳和若干小分子气体置换天然气水合物的多尺度模拟, 2021.01-2024.12, 主持

(2) 海南省自然科学基金面上项目, 221MS0771, 黄酮类化合物共晶的虚拟筛选与评价, 2021.12-2024.09, 主持

### 4、科研成果

(1) Di Wu, **Hua Jie Feng**<sup>\*</sup>, Li Hua Xu, et al. Optimal design of a small-molecule crowding electrolyte and molecular dynamics simulation of an electrode–electrolyte interface for aqueous supercapacitors with a wide operating temperature range. ACS Applied Energy Materials, 2022, 5(1): 355-366.

(2) **Huajie Feng**, Wei Gao, Li Su, et al. Evolution of diffusion and structure of six *n*-alkanes in carbon dioxide at infinite dilution over wide temperature and pressure ranges: a molecular dynamics study. Journal of Molecular Modeling, 2019, 25(12): 370.

(3) Jianling Li, Guohua Ding, Yanyan Niu, Luyong Wu, **Huajie Feng**<sup>\*</sup>, Wenyong He<sup>\*</sup>. The structural properties of 5-methyl-2-phenyl-2*H*-1,2,3-triazole-4-carboxylic acid and chromogenic mechanism on its rhodamine B derivatives to Hg<sup>2+</sup> ions. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2018, 200: 127-135.

(4) **Huajie Feng**, Wei Gao, Zhenfan Sun<sup>\*</sup>, et al. Molecular dynamics simulation of diffusion and structure of some *n*-alkanes in near critical and supercritical carbon dioxide at infinite dilution. Journal of Physical Chemistry B, 2013, 117(41): 12525-12534.

(5) **Huajie Feng**, Xin Liu<sup>\*</sup>, Wei Gao, et al. Evolution of self-diffusion and local structure in some amines over a wide temperature range at high pressures: a molecular dynamics simulation study. Physical Chemistry Chemical Physics, 2010, 12(45): 15007-15017.