

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	
研究方向:	理论与计算化学	
招生专业:	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 至现在, 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、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) 海南省科学技术厅, 重点研发计划项目, ZDYF2019160, 二氧化碳和若干大气污染气体置换天然气水合物的模拟研究, 2019-04 至 2021-04

(2) 海南省科学技术协会, 青年科技英才学术创新计划项目, HAST201621, 基于共轭含氧化合物的锂离子电池正极材料的多尺度模拟研究, 2016-01 至 2018-12

4、科研成果

(1) **Huajie Feng**, Wei Gao, Li Su, Yanchun Liu, Zhenfan Sun*, Liuping Chen*. 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.

(2) Jianling Li, Guohua Ding, Yanyan Niu, Luyong Wu, **Huajie Feng***, Wenying He*. The structural properties of 5-methyl-2-phenyl-2H-1,2,3-triazole-4-carboxylic acid and chromogenic mechanism on its rhodamine B derivatives to Hg²⁺ ions. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2018, 200: 127-135.

(3) **Huajie Feng**, Wei Gao, Li Su, Zhenfan Sun*, Liuping Chen*. Diffusion and local structure of *n*-alkanes in liquid and supercritical methanol at infinite dilution: a MD simulation study, *Journal of Molecular Modeling*, 2017, 23(6): 195.

(4) **Huajie Feng**, Wei Gao, Zhenfan Sun*, Bingxin Lei, Gaonan Li and Liuping Chen*. 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*, Wei Gao, Xiaojuan Chen, Jing Wang, Liuping Chen* and Hans-Dietrich Lüdemann. 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.