

基本信息

教育背景

工作履历

学术兼职

研究领域

科研项目

学术成果



易海波

发布于：2018-01-08 星期一 22:23:30 点击数：737

副教授，博士生导师，物理化学方向

Email: hbyj@hnu.edu.cn

Cell Phone: 13574869952

QQ:6771633

基本信息

易海波，1974.4，湖南省澧县。副教授，博士生导师，中国农工党员。承担结构化学、量子化学、分子模拟与计算化学、物理化学与相关实验等理论与实验课程，承担结构化学课程微课建设。新化工楼A区-315室、A区-319室，hbyj@hnu.edu.cn，13574869952。

教育背景

1994.9~1998.7，湖南师范大学化学系，化学教育专业学士学位

2002.6~2003.4，韩国浦项科技大学化学系，访问博士生

1998.9~2003.7，四川大学化学学院，物理化学专业博士学位

工作履历

2003.8~2005.8，韩国浦项科技大学超功能材料国家创新实验中心，助理研究员、博士后

2009.8~2009.10，韩国浦项科技大学World Class University (WCU) projects项目组，短期合作研究

2005.8~，湖南大学化学化工学院

学术兼职

研究领域

溶剂化自由能模型与溶液中物种结构特征及分配规律

基于量子化学计算、分子动力学模拟及统计热力学模型研究盐水体中主要物种与分配规律；完善基于QM/MM模拟的溶剂化自由能模型；改进电解质溶液的化学反应速率导电效率问题；结合具体分子团簇模型、化学反应探讨溶剂化对一些物种的物理化学性质与关键步骤反应机理的影响

溶液中介稳现象与介稳结构及其热力学性质

基于量子化学计算、分子动力学模拟及分子光谱研究溶液中介稳现象与结构特征，探讨盐湖资源开发的冻卤过程、湿法冶金过程、无机储能材料应用过程及一些化工过程和、过冷与循环效率问题

化学过程的微观机理与光谱特征及溶液中离子自组装机理

基于量子化学计算与分子动力学模拟研究一些典型化学过程的微观机理与光谱特征；基于离子水合特征的热力学与动力学分析，综合统计分析与分子轨迹分析，多维度地簇结构周围的水分子的动态性质，从分子水平探究溶液中离子组装的量子拓扑图像，研究溶液中成核结晶过程的关键步骤与影响结晶路径、沉降趋势的重要因素；结合热力学



基本信息

教育背景

工作履历

学术兼职

研究领域

科研项目

学术成果

物理化学处理方法微观机制及相关问题

科研项目

国家自然科学基金项目

国家自然科学基金联合基金培育项目“低温条件下盐湖卤水体系中离子团簇特征与介稳相性质及离子缔合物种分配规律的研究” U1507101、2016年~2018年、50万、主持。

国家自然科学基金面上项目“多元金属氯化物溶液微观结构、热力学性质及特征光谱的研究”、21073056、2011/01-2013/12、36万、已结题、主持。

国家863高技术项目“新型高效二氧化碳吸收剂与吸收捕集技术的研发” 2009AA05Z319、2009/1~2011/5、50万、已结题、参与。

国家自然科学基金面上项目“复杂氟化物多元体系的结构与性质关系的研究”、20773036、2008/1~2010/12、28万、已结题、参与。

省部级自然科学基金项目

湖南省自然科学基金项目“含砷废水中离子团簇特征与铁盐除砷微观机制的研究” 2016JJ2014、2016年~2018年、5万、主持。

教育部留学回国启动基金“金属纳米材料的自组装过程以及聚乙烯吡咯烷酮(PVP)诱导保护作用的理论计算研究” 教外司留(2007)108号、2008/01-2009/12、2万、已结题、主持。

湖南省节能减排科技重大专项“重金属冶炼节能减排关键技术与示范工程”、2008SK1002、2008/1~2010/12、670万、(天冬氨酸分子改型与阻垢机理的理论计算研究课题)11.5万、已结题、主持。

横向科研项目

国家重金属污染防治工程技术研究中心开放研究基金项目“含砷废水中介稳离子团簇结构特征与水合壳层性质的研究”、2016年~2017年、5万、主持。

四川大学技术开发项目“碳氢燃料热裂解过程典型基元反应动力学数据构建研究”、2015年~2016年、7万、主持。

学术成果

2003年以来一直从事溶液中的离子水合与缔合结构、超分子结构与离子识别、介稳结构、溶液中团聚特征等方面研究，发表研究论文304篇(400次以上，H指数大于10)。研究工作主要有：

溶液中离子水合特征与离子识别以及溶剂化等方面的研究

2003年~2005年(博士后研究)，进行离子水合与缔合结构、超分子结构与离子识别等方面研究，主要研究项目是关于碱金属离子与卤素结构以及CsF微溶解等，关于金属离子自组装与溶液中的离子识别等。先后在*Theor. Chem. Acc.*(2006), *J. Phys. Chem. B*(2006), *Chem. - Eur. Chem. Phys.*(2003, 2006)等学术刊物上发表有关离子水合与离子识别、电子转移与溶剂化效应等方面的研究成果。

重金属废水处理与阻垢缓释剂领域的相关工程经历

2008年~2010年，参与湖南省节能减排科技重大专项“重金属冶炼节能减排关键技术与示范工程”，进行天冬氨酸分子改型与阻垢机理的研究，参与重金属污水处理工艺的部分研究，了解污水处理与阻垢剂等研究，积累了工程实践经验。期间在*J. Chem. Theory Comput.*(2009)期刊组装机过程中结构特征方面的理论研究结果，论文受到较多关注，被两篇*Chem. Rev.*引用。

氯化物盐水溶液微观结构与离子团簇结构以及光谱特征

2009年~2011年，主要研究溶液微观结构与光谱特征、溶液中离子水合与缔合。结合量子化学方法、溶剂化模型的改进以及电子光谱与紫外实验，研究了盐水溶液中的离子水合与缔合、物种特征与分配规律，主要研究结果发表在*J. Phys. Chem. A* (2009, 2010, 2011)期刊。铜氯化物析结果受到国内外同行较多的关注，相关理论结果(Cu^{2+} 倾向与五配位、离子缔合后倾向于四配位、缔合物种)先后被其他实验方法所验证。2012年来，通过从头算MD与经典MD等方法以及EXAFS实验研究了盐水溶液的离子缔合与团聚特征以及离子水合壳层性质，代表性研究论文有*J. Phys. Chem. A*(2013, 2016), *Mol. Phys.*(2013 & 2014 & 2015), *Geochim. Cosmochim. Acta* (2015, 地质化学top期刊)。

盐水溶液介稳结构与团聚特征以及成盐规律的初步研究

随着理论/实验的研究方法和研究思路的改进，溶液中离子团簇特征与离子团聚过程的研究条件越来越成熟。但是仅从实验手段很难在原子上直接研究溶液中成核与结晶过程，溶液的离子团聚过程的时间尺度和体系尺寸也常远超过MD模拟的限度。某些力场与水分子模型的MD模拟常会受到质疑。因此，结合量子化学计算、MD模拟以及一些实验方法来研究溶液中离子团聚与离子团簇特征是一个较理想的选择，同时有针对离子团聚与成核机理的研究，探讨成盐规律、生物矿化与自组装机理、水相中离子吸附机理以及影响与控制因素。采用经典MD、CPMD、REM退火法与部分光谱实验研究了离子/离子团簇结构与其水合作用以及离子团聚路径，初步研究结果显示，结合团聚特征与团簇水合壳层性质两能更好地揭示盐水溶液中成核前的离子团聚过程，进而预测一些成核路径与影响因素。

基本信息

教育背景

工作履历

学术兼职

研究领域

科研项目

学术成果

PhysChemChemPhys(2017), Chemosphere(2018)。最近,在路径文件的基础上,用Fortran95程序语言与脚本程序语言编写了离子团特征、离子合状态的存在时间、水合壳层动态特征、“自由”水分子数、氢键寿命、水合壳层中氢键分布特征的数据分析程序,丰富了团聚结构与水合壳层的分析方法。数据分析结果可采用VMD、Gauss View等程序进行图形处理。从原子和分子水平上直接研究溶液中成核与结晶过程仍面临很多挑战,不断完善相关研究方案与思路。

理论模拟与实验研究的合作

与多个实验课题组进行了一些合作研究,包括有机催化中水合结构与化学反应过程、表面吸附与界面结构、生物分子识别与传感过程中研究结果发表/待发表在*Org.Lett.*(2015), *NucleicAcidsRes.* (2016, 2017), *Inorg.Chem.Commun.*(2016, 2017), *Chemosphere* (2017), *Chem.E.* (2018), *RSC Adv.*(2018), *Euro.J.Med.Chem.* (2018), *Angew.Chem.Int.Edit* (2018), *PCCP* (2018), *ACS Nano*(submit)等期刊。

发表的论文(2006年~)如下:

- (1) Ren TB, Xu W, Zhang QL, Zhang XX, Wen SY, **Yi, HB**, Yuan L*, Zhang XB Harvesting Hydrogen Bond Network: Enhance the Anti-Solvatochromic Two-Photon F for Cirrhosis Imaging, *Angewandte Chemie International Edition*, 2018, **ASAP**.
- (2) Wang ZH, Wu YJ, Xue, HH, Zhou LN, Geng WC, **Yi HB*** Li YJ* What Dictates Who, I? or Br?, Mediates the Growth of Cubic Pd Nanoparticles? *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2018**, 20, 10997-11002.
- (3) Yan ZZ, Liu AP, Huang, MZ, Liu, MH, Pei H,Huang L, **Yi, HB**, Liu WD*, Hu AX* Design, synthesis, DFT study and antifungal activity of the derivatives of pyrazolecarboxamide containing thiazole or oxazole ring, *European Journal of Medicinal Chemistry*, **2018**, 149, 170-181.
- (4) Zhang N*, **Yi HB**, Zeng DW,* Zhao ZW, Wang WL, Costanzoe F. Structure evolution of mononuclear tungsten and molybdenum species: Insight from FPM calculations, *Chemical Physics*, **2018**, 502, 77-82.
- (5) Yang FL, Xia FF*, Hu J. Zheng CZ, Sun JH, **Yi HB***, The Improvement of Photocatalytic Activity of Monolayer g-C₃N₄ via Surface Charge Transfer Doping, *J* **2018**, 8, 1899-1903.
- (6) Yan D, Li HJ, Cai HQ, Wang M, Wang CC, **Yi HB***, Min XB, Microscopic insight into precipitation and adsorption of As(V) species by Fe-based materials in aqueous phase, *Chemosphere*, **2018**, 194, 117-124.
- (7) Fu WJ, Li B*, Yang JQ, **Yi HB**, Chai LY, Li XY, New insights into the chlorination of sulfonamide: Smiles-type rearrangement, desulfation, and product toxicity, *Engineering Journal*, **2018**, 331, 785-793.
- (8) Li HJ, Yan D, Cai HQ, **Yi HB***, Min XB, Xia FF Insights into water-mediated ion clustering in aqueous CaSO₄ solutions: Pre-nucleation cluster characteristics from ab initio calculations and molecular dynamics simulations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2017**, 19, 11390-11403.
- (9) Feng GF, Luo C, **Yi HB**, Yuan L, Lin B, Luo XY, Hu XX, Wang HH, Lei CY, Nie Z,* Yao SZ DNA mimics of red fluorescent proteins (RFP) based on G-quadruplex confined synthetic RFP chromophores, *Nucleic Acids Research*, **2017**, 45(18),10380-10392.
- (10) Yu WD, Nie YM, Yuan H, Yan J*, **Yi HB**, Synthesis and characterization of a highly stable zinc phenylporphyrin Isoxazoline-[60] fullerene dyad: Impact of the redox and fluorescence properties, *Inorganic Chemistry Communications*, **2017**, 84, 134-137
- (11) Chai LY, Yang JQ, Zhang N, Wu PJ, Li QZ*, Wang QW, Liu H, **Yi HB**, Structure and spectroscopic study of aqueous Fe(III)-As(V) complexes using UV-Vis, XPS and TDDFT, *Chemosphere*, **2017**, 182, 595-604.
- (12) Li W, Li Y, Liu ZL, Lin B, **Yi HB**, Xu F, Nie Z*, Yao SZ, Insight into G-quadruplex-hemin DNAzyme/RNAzyme: adjacent adenine as the intramolecular specific site for remarkable enhancement of enzymatic activity, *Nucleic Acids Research*, **2016**, 44(15), 7373-7384.
- (13) Wang, YL, Wang Y, **Yi HB***, High-Order Ca(II)-Chloro Complexes in Mixed CaCl₂-LiCl Aqueous Solution: Insights from Density Functional Theory and Molecular Dynamics Simulations, *Journal of Physical Chemistry A*, **2016**, 120, 5635-5648.
- (14) Zhou JL*, Xua YH, Jin XX, Xiao S, **Yi HB**, Yan J*, Synthesis and characterization of luminescent zinc complexes containing redox-active 1-(2-pyridylazo)-2-naphthol ligands with nonlinear optical property. *Inorganic Chemistry Communications*, **2016**, 64, 67-70.
- (15) Wu JM, Wang Q, Zeng L, Chen Y*, Liu P, **Yi HB***, Synthesis, Structure and Polymorphism of a Novel Two-dimensional Cobalt(II) Coordination Polymer with Citrazinate Ligand, *Chinese Journal of Structural Chemistry*, **2016**, 35(1), 93-99.
- (16) Dai Q, Xu JJ, Li HJ, **Yi HB***, Ion association characteristics in MgCl₂ and CaCl₂ aqueous solutions: a density functional theory and molecular dynamics investigation. *Molecular Physics*, **2015**, 113(22), 3545-3558.
- (17) Li HJ, Xu JJ, **Yi HB***, High-order Cu(II) chloro-complexes in LiCl brines: insights from density function theory and molecular dynamics. *Geochimica Cosmochimica Acta*, **2015**, 165, 1-13.
- (18) 王莹, 易海波*, 李会吉, 代倩, 曹治炜, 路洋, 盐水溶液中离子与丙氨酸极性基团间的作用对丙氨酸缩合的影响: 密度泛函理论与分子动力学模拟. *物理化学学报*, **2015**, 31, 1044.
- (19) Chen, JY, Tang, Z; Qiu, RH*, He, YH, Wang, X, Li, NB; **Yi, HB***, Au, C.-T., Yin, S; Xu, XH*, Cesium-Catalyzed Regioselective synthesis of trisubstituted heteroalkenes: a new strategy for the preparation of functional alkenes, *Organic Letters*, **2015**, 17(9), 2162-2165.
- (20) Xu JJ, Bai G, **Yi HB***, Li HJ, Chen Y*, Ionic solvation and association in LiCl aqueous solution: a density functional theory, polarised continuum model and molecular dynamics investigation. *Molecular Physics*, **2014**, 112(12), 1710-1723.
- (21) Xia FF, Zeng DW*, **Yi HB***, Fang CH, Direct Contact versus Solvent-Shared Ion Pairs in Saturated NiCl₂ Aqueous Solution: A DFT, CPMD, and EXAFS Investigation. *Journal of Physical Chemistry A*, **2013**, 117, 8468-8476.

基本信息

教育背景

工作履历

学术兼职

研究领域

科研项目

学术成果

imidazolyl-L-lactamic acid. *Journal of Molecular Structure*, **2013**, 1050, 211–215.

(24) 龙杰义, 易海波*, 刘星楷, 汪易非, 基于密度泛函理论计算的多氯联苯毒性的定量结构-性质关系研究, *化学学报*, **2012**, 70(8), 949–960.

(25) **Yi HB***, Xia FF, Zhou QB, Zeng DW*, [CuCl₃]⁻ and [CuCl₄]²⁻ hydrates in concentrated aqueous solution: A density functional theory and ab Initio study. *Physical Chemistry A*, **2011**, 115(32), 4416–4426.

(26) Xia FF, **Yi HB***, Zeng DW*, Hydrates of Cu²⁺ and CuCl⁺ in dilute aqueous solution: A density functional theory and polarized continuum model investigation. *Physical Chemistry A*, **2010**, 114(32), 8406–8416.

(27) **Yi HB***, Lee HM, Kim KS*, Interaction of benzene with transition metal cations: Theoretical study of structures, energies, and IR spectra. *Journal of Chemical Physics*, **2009**, 130, 1709–1717.

(28) Xia FF, **Yi HB***, Zeng DW*, Hydrates of copper dichloride in aqueous solution: A density functional theory and polarized continuum model investigation. *Physical Chemistry A*, **2009**, 113(51), 14029–14038.

(29) **Yi HB**, Diefenbach M, Choi YC, Lee EC, Lee HM, Hong BH, Kim KS*, Interactions of neutral and cationic transition metals with the redox system of hydroquinone: Theoretical characterization of the binding topologies, and implications for the formation of nanomaterials. *Chemistry - A European Journal*, **2006**, 12, 4892.

(30) **Yi HB**, Lee HM, Suh SB, Shin SK, Kim KS*, Pseudorotation-driven dynamical structure of the tropyli radical. *Journal of Chemical Physics*, **2006**, 125(16), 16410.

(31) Singh NJ¹, **Yi HB**¹, Min SK, Kim KS*, et al., Dissolution nature of cesium fluoride by water molecules. *Journal of Physical Chemistry B* **2006**, 110 (8), 3808–3814.

(32) Singh NJ, Olleta AC, Kumar A, Park M, **Yi HB**, Kim KS*, et al., Study of interactions of various ionic species with solvents toward the design of receptors. *Chemistry Accounts*, **2006**, 115 (2-3), 127–135.

奖励与荣誉

湖南大学化学化工学院版权所有 2017

通讯地址: 湖南长沙岳麓山 邮编: 410082 Tel: 0731-88822286 Fax: 0731-88713642