



张岩

教授

硕士生导师

yan_zhang@dlnu.edu.cn

教育背景

德国马普煤炭研究所博士后（2010）
美国罗拉多大学丹佛分校博士后（2008）
中国科学院大连化学物理研究所理学博士（2005）
大连理工大学理学学士（2000）

研究领域

射线损伤活性细胞 DNA 机理研究
QM/MM 方法发展及程序开发
生物分子体系模拟

代表性成果

论文类：

(1) **Yan Zhang**;^{*} Jiayue Wang; Songqiu Yang; Notable effect of water on excess electron attachment to aqueous DNA deoxyribonucleosides. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2019**, *21*, 8925–8932. (SCI)

(2) **Yan Zhang**;^{*} Peng Xie; Songqiu Yang; Keli Han;^{*} Ionization and Electron Attachment for Nucleobases in Water. *J. Phys. Chem. B*, **2019**, *123*, 1237–1247. (SCI)

(3) **Yan Zhang**;^{*} Peng Xie; Xiaohu He; Keli Han;^{*} High-Efficiency Microiterative Optimization in QM/MM Simulations of Large Flexible Systems. *J. Chem. Theory Comput.*, **2016**, *3*, 1378–1398. (SCI)

(4) **Yan Zhang**; Hai Lin,^{*} Flexible-boundary

quantum-mechanical/molecular-mechanical calculations: 1. partial charge transfer between the quantum-mechanical and molecular-mechanical subsystems based on electronegativity equalization. *J. Chem. Theory Comput.*, **2008**, *4*, 414–425. (SCI)

(5) **Yan Zhang**; Hai Lin;* Donald G. Truhlar; Self-consistent polarization of the boundary in the redistributed charge and dipole scheme for combine quantum-mechanical and molecular-mechanical calculations. *J. Chem. Theory Comput.*, **2007**, *3*, 1378–1398. (SCI)

代表性项目

- (1) 国家自然科学基金青年项目，21103167，生物大分子 QM/MM 反应速率常数的计算，2012/01–2014/12，已结题，主持。
- (2) 国家自然科学基金面上项目，21773226，液相 DNA 及其阴离子基态破损的 QM/MM 模拟方法发展和机理研究，2018/01–2021/12，已结题，主持。
- (3) 国家自然科学基金面上项目，22173014，极化植入 QM/MM 模拟研究液相长链 DNA 的过电子附着，2022/01–2025/12，在研，主持。