

长安大学环工学院 >> 化学工程系 >> 周朝晖



周朝晖

男，汉族，1985年11月生于安徽省合肥市，已婚，现居于西安市新城区幸福南路85号。

教育背景

2012年，博士，西安交通大学动力工程与工程热物理专业

博士论文题目:基于第一性原理的光催化剂带边计算与预测研究:表面和层错的产氢能力评估

2005年，学士，西安交通大学应用物理专业

工作经历

2020/01-至今，副教授，长安大学水环学院化工系，硕士生导师

2017/10-2019/12，讲师，长安大学环工学院化工系

2012/12-2016/12，新讲师（师资博士后），西安交通大学新能源科学与工程系

2015/05-2016/05，博士后，南加州大学化学系

主要研究领域和方向

光电催化能源转化与利用

绝热和非绝热分子动力学模拟

光电化学电极材料性质计算和界面模拟

学术成果

[1] Z.H. Zhou, R. Long, O.V. Prezhdo*. Why Silicon Doping Accelerates Electron Polaron Diffusion in Hematite. *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141(51): 20222-20233. DOI: 10.1021/jacs.9b10109 (IF: 14.695)

[2] Z.H. Zhou, J. Liu, R. Long, L.Q. Li, L.J. Guo and O.V. Prezhdo*. Control of charge carriers trapping and relaxation in hematite by oxygen vacancy charge: ab-initio non-adiabatic molecular dynamics. *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139(19): 6707-6717 (chosen for JACS Spotlight). DOI: 10.1021/jacs.7b02121. (IF: 13.858)

[3] Z.H. Zhou, F.S. Han, L.J. Guo and O.V. Prezhdo*. Understanding divergent behaviors in the photocatalytic hydrogen evolution reaction on CdS and ZnS: a DFT based study. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, 18(25): 16862-16869. DOI: 10.1039/c6cp02599d. (IF: 4.123)

[4] Z.H. Zhou*, J.W. Shi, L.J. Guo. A comparative study on structural and electronic properties and formation energy of bulk α -Fe₂O₃ using first-principles calculations with different density functionals. *Comput. Mater. Sci.* 2016, 113: 117-122. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.11.030. (IF: 2.292)

[5] Z.H. Zhou, P.J. Huo, L.J. Guo, and Oleg V. Prezhdo*. Understanding Hematite Doping with Group IV Elements: A DFT+U Study. *J. Phys.*

Chem. C 2015, 119(47): 26303-26310. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b08081. (IF: 4.536)

[6] Z.H. Zhou*, J.W. Shi, P. Wu, L.J. Guo*. A first-principles investigation on microscopic atom distribution and configuration-averaged properties in Cd_{1-x}Zn_xS solid solutions. ChemPhysChem 2014, 15(14): 3125-3132. DOI: 10.1002/cphc.201402164. (IF: 3.075)

[7] Z.H. Zhou*, M.T. Li, P. Wu, L.J. Guo*. Revisiting the Zinc-Blende/Wurtzite Heterocrystalline Structure in CdS. Adv. Condens. Matter Phys. 2014, 2014: 361328. DOI: 10.1155/2014/361328. (IF: 1.044)

[8] Z.H. Zhou*, J.W. Shi, P. Wu, L.J. Guo*. Configuration dependence of the properties of Cd_{1-x}Zn_xS solid solutions by first-principles calculations. Phys. Status Solidi B 2014, 251(3): 655-660. DOI: 10.1002/pssb.201350180. (IF: 1.674)

[9] Z.H. Zhou, J.W. Shi, P. Wu, M.T. Li, L.J. Guo*. First-principles study on absolute band edge positions for II-VI semiconductors at (110) surface. Chem. Phys. Lett. 2011, 513: 72-76. DOI: 10.1016/j.cplett.2011.07.065. (IF: 1.815)

[10] Z.H. Zhou, M.T. Li, L.J. Guo*. A first-principles theoretical simulation on the electronic structures and optical absorption properties for O vacancy and Ni impurity in TiO₂ photocatalysts. J. Phys. Chem. Solids 2010, 71: 1707-1712. DOI: 10.1016/j.jpcs.2010.08.021. (IF: 2.059)

[11] 周朝晖, 郭烈锦*. Cd_{1-x}Zn_xS能带第一性原理计算. 西安交通大学学报, 2008, 42(2): 248-251.

[12] F.S. Han, Z.H. Zhou*, Z.X. Huang, M.T. Li, L.J. Guo*. Effect of Water Adsorption on Interfacial Structure and Band Edge Alignment of Anatase TiO₂ (001)/Water by First-Principles Molecular Dynamics. J. Phys. Chem. C, 2018, 122 (47): 26965-26973. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b09191. (IF: 4.536)

[13] F.S. Han, Z.H. Zhou*, X.H. Zhang, Z.X. Huang, M.T. Li, L.J. Guo*. First-Principles Study on Stability and HER Activity of Noble Metal Single Atoms on TiO₂: The Effect of Loading Density. J. Phys. Chem. C 2018, 122(5): 2546-2553. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b11486. (IF: 4.536)

[14] J.W. Shi*, Y.Z. Zhang, Z.H. Zhou*, Y.X. Zhao, J.Y. Liu, H.B. Liu, X. Liao, Y.C. Hu, D.M. Zhao and S.H. Shen*. LaTiO₂N-LaCrO₃: Continuous solid solutions towards enhanced photocatalytic H₂ evolution under visible-light irradiation. Dalton Trans. 2017, 46, 10685-10693. DOI: 10.1039/c7dt01267e. (IF: 4.029)

[15] J.Z. Su*, J.L. Zhou, S.C. Zong, Z.H. Zhou*, C. Liu, B. Feng. Thermal annealing effect the interfacial property and photoelectrochemical performance of Ti doped Fe₂O₃ nanowire arrays. RSC Adv. 2016, 6: 99851-99858. DOI: 10.1039/C6RA19699C. (IF: 3.108)

[16] Y.Q. Wei, Z.H. Zhou, W.H. Fang, R. Long*. Grain Boundary Facilitates Photocatalytic Reaction in Rutile TiO₂ Despite Fast Charge Recombination: A Time-Domain Ab Initio Analysis. J. Phys. Chem. Lett. 2018, 9(19): 5884-5889. DOI: 10.1021/acs.jpclett.8b02761. (IF: 9.353)

参与项目

(1) 主持陕西省自然科学基础研究计划一般项目（青年）：氧化铁光阳极界面电荷载流子复合动力学研究，项目编号：2019JQ-440，时间：2019/01-2020/12

(2) 主持长安大学中央高校基本科研业务费基础研究培育项目：第一性原理分子动力学研究氧化铁光阳极水氧化界面结构，项目编号：300102298106，时间：2018/01-2019/12

(3) 主持中国博士后科学基金二等面上一项：孪晶界超晶格纳米线合成条件探索，项目编号：2013M542343，时间：2013/09-2015/08

(4) 主持西安交通大学中央高校基本科研业务费自由探索一项：纳米金属颗粒负载TiO₂光催化剂分解水的机理研究，项目编号：xjj2013004，时间：2013/01-2015/12

(5) 参与国家自然科学基金优秀国家重点实验室研究项目一项:连续多相流动体系下热物理化学、光热物理化学基础与规律的研究,项目

编号: 51323011, 时间: 2014/01-2017/12

(6) 参与国家重点基础研究计划一项: 解聚产物催化制氢的基础研究, 项目编号: 2012CB215303, 时间: 2012/01-2016/08

(7) 主持中国石油天然气集团公司管材研究所技术服务项目一项: 全尺寸腐蚀机理分析, 项目编号: 2019610002002504, 时间: 2019/01-2019/12

联系方式

zzhlax@chd.edu.cn

zzhlax@live.cn

[\[返回\]](#)