



## 张悦 硕士生导师

职 称：副教授

职 务：无

研究方向：混凝土耐久性，计算材料理论

通信地址：青岛市黄岛区嘉陵江东路 777 号

联系方式：zhangyue1723@gmail.com



### 个人简介

青岛理工大学土木工程学院副教授，主要从事水泥基材料微观机理与计算材料学研究。近年来围绕水泥水化过程、C-S-H 结构演化以及离子在水泥体系中的固化机制开展系统研究，综合运用第一性原理计算、分子动力学模拟与实验分析等方法，探索材料结构与性能之间的内在联系。同时关注人工智能与材料科学的交叉应用，利用高通量计算与机器学习方法开展材料性能预测与分子设计研究，相关成果发表于 *Cement and Concrete Research*、*Construction and Building Materials* 等国际期刊。

除科研工作外，本人爱好广泛，长期热心科学传播，是一名活跃的天文科普工作者和天文摄影爱好者，经常通过望远镜观测活动向公众介绍星空与宇宙。对自然科学的广泛兴趣也融入教学与科研之中，希望通过科研训练培养学生的科学思维与探索精神。欢迎对计算材料学、分子模拟、人工智能材料设计等方向感兴趣的同学加入课题组，共同探索材料世界的微观奥秘。

### 学习经历

- 2005.09-2009.06，华北理工大学，矿物加工工程专业，工学学士
- 2008.09-2011.07，华北理工大学，矿物加工工程专业，工学硕士
- 2011.09-2015.12，北京科技大学，矿物加工工程专业，工学博士
- 2025.01-2025.12，Missouri University of Science and Technology，访问学者

### 工作经历

- 2016.8-2018.08，清华大学，助理研究员

- 2019.05-至今，青岛理工大学土木工程学院，副教授

## 学术兼职

- 2021.09-至今，《Frontier in materials》编委
- 2024.08-至今，中国硅酸盐学会固废与生态材料外加剂学委会 委员
- 2019.12-至今，Cement and Concrete Research 审稿人
- 2017.08-至今，《中国国家天文》 特约撰稿人
- 2023.01-至今，山东省天文学会青年工作委员会 委员

## 教科研项目

- 2021.01-2023.12，铜尾矿混凝土水化机理及其微结构研究，国家自然科学基金青年项目，主持
- 2021.01-2023.12，基于量子化学的复杂胶凝体系混凝土水化历程研究，山东省自然科学基金青年项目，主持
- 2024.01-2026.12，垃圾焚烧灰渣重金属固化机理及地聚物固化材料设计，山东省自然科学基金面上项目，主持
- 2025.10-2027.10，基于无人机喷射 UHPC 的滨海智能修补平台，滨海人居环境学术创新中心开放课题，主持
- 2021.10-2023.10，青岛理工大学教学改革与研究项目，主持

## 学术成果

### 代表性著作、论文：

[1] **Zhang, Y.**, Zhu, F., Hou, D., Wang, P., Guan, J., Wang, X., ... & Shen, P. The Dynamic Solidification Mechanism of Copper Ions on the Surface of Hydrated Calcium Silicate (CSH): A Molecular Simulation Study Based on Metadynamics. Available at SSRN 5183537.

[2] Zhu, F., Hou, D., Wang, P., Wang, M., Wang, X., Guan, J., & **Zhang, Y\***. (2025). The mechanism of copper ion solidification by calcium silicate hydrate and the influence of defects: A first-principles study. *Construction and Building Materials*, 466, 140271.

[3] **Zhang, Y.**, Xin, Z., Ding, Z., Wang, P., Wang, M., Wang, X., ... & Hou, D. (2024). Insight into hydration

inhibition mechanism of amino trimethylene phosphonic acid on tricalcium silicate from first - principles calculations. *International Journal of Quantum Chemistry*, 124(3), e27338.

[4] Xin, Z., **Zhang, Y.**, Hou, D., Sun, H., Ding, Z., Wang, P., ... & Zhang, L. (2023). Atomic Insights into the Relationship between Molecular Structure and Dispersion Performance of Phenyl Polymer on Graphene Oxide. *Langmuir*, 40(1), 413-425.

[5] Xin, Z., Ding, Z., Li, Z., & **Zhang, Y\***. (2023, April). 41.1: Invited Paper: Design of Organic Electroluminescence Material via High - Throughput Screening For OLED Applications. In *SID Symposium Digest of Technical Papers* (Vol. 54, pp. 280-286).

[6] Hou, D., Ding, Z., Wang, P., Wang, M., Xu, Q., Wang, X., ... & **Zhang, Y\***. (2022). Influence of Cu doping on the hydration of dicalcium silicate: a first-principles study. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 10(24), 8094-8104.

[7] Ding, Z., **Zhang, Y.**, Wang, P., Wang, M., Xu, Q., Xin, Z., ... & Hou, D. (2023). First-principle insights of initial hydration behavior affected by copper impurity in alite phase based on static and molecular dynamics calculations. *Journal of Cleaner Production*, 398, 136478.

[8] Ding, Z., Xin, Z., Guo, X., Xu, Q., Dong, H., Cheng, J., & **Zhang, Y\***. (2022, October). 26.2: Invited Paper: Computational chemistry study of an aggregation - induced delayed fluorescence material: synthesis and properties. In *SID Symposium Digest of Technical Papers* (Vol. 53, No. S1, pp. 286-299).

[9] **Zhang, Y.**, Xu, Q., Sun, M., Xiong, C., Wang, P., Chen, Z., ... & Hou, D. (2021). Insights into vitamin B3, B6 and C as inhibitor of steel reinforcement: A DFT+ U study. *Construction and Building Materials*, 294, 123571.

[10] Xu, Q., Hou, D., Zhang, H., Wang, P., Wang, M., Wu, D., ... & **Zhang, Y\***. (2022). Understanding the effect of vitamin B3, B6 and C as a corrosion inhibitor on the ordinary Portland cement hydration: Experiments and DFT study. *Construction and Building Materials*, 331, 127294.

[11] Hou, D., Zhang, J., Pan, W., **Zhang, Y\***, & Zhang, Z. (2020). Nanoscale mechanism of ions immobilized by the geopolymer: A molecular dynamics study. *Journal of Nuclear Materials*, 528, 151841.

[12] **Zhang, Y.**, Lu, X., Song, D., & Liu, S. (2019). The adsorption of a single water molecule on low-index C3S surfaces: A DFT approach. *Applied Surface Science*, 471, 658-663.

[13] **Zhang, Y.**, Lu, X., Song, D., & Liu, S. (2019). The adsorption behavior of a single and multi - water

molecules on tricalcium silicate (111) surface from DFT calculations. Journal of the American Ceramic Society, 102(4), 2075-2083.

[14] **Zhang, Y.**, Lu, X., He, Z., & Song, D. (2018). Molecular and dissociative adsorption of a single water molecule on a  $\beta$  - dicalcium silicate (100) surface explored by a DFT approach. Journal of the American Ceramic Society, 101(6), 2428-2437.

[15] **Zhang, Y.**, Lin, H., Dong, Y. B., Xu, X. F., Wang, X., & Gao, Y. J. (2017). Coupling relationship between multicomponent recovery of rare earth tailings. Rare Metals, 36(3), 220-228.

### 代表性专利:

[1] Dongshuai Hou, Xinpeng Wang, Mengmeng Li, Qihui Geng, Pan Wang, Bing Yin, **Yue Zhang**. Lightweight aggregate ultra-high performance concrete(UHPC) and preparation method thereof [P]. United States Patent US11447419B2, 2022-09-20.

[2] 尹兵, 侯东帅, 徐天元, 王鑫鹏, **张悦**. 一种混凝土防腐涂层及其制备方法[P]. 中国发明专利 CN110540768A, 2019-12-06.

[3] 侯东帅, 王慕涵, 纪翔, 王攀, 王鑫鹏, **张悦**. 一种混凝土体系中聚羧酸系减水剂性能测试方法及系统 [P]. 中国发明专利 CN114444300A, 2022-05-06.

[4] 侯东帅, 王慕涵, 纪翔, 王攀, 王鑫鹏, **张悦**. 一种混凝土体系中聚羧酸系减水剂性能测试方法及系统 [P]. 中国发明专利 CN114444300A, 2022-05-06.

[5] 侯东帅, 王鑫鹏, 李萌萌, 耿旗辉, 王攀, 尹兵, **张悦**. 一种轻骨料超高性能混凝土及其制备方法 [P]. 中国发明专利 CN111039626A, 2020-04-21.

### 荣誉奖励

- 2019.12, 青岛市科学技术奖, 青岛市人民政府
- 2021.04, 青岛理工大学土木工程学院讲课比赛一等奖, 青岛理工大学土木工程学院
- 2021.05, 山东省一流本科课程, 山东省教育厅
- 2021.06, Innovation Award, 2021 International Concrete Dragon Boat Competition