

安徽省科学技术奖提名项目公示内容

(自然科学奖, 2024 年度)

一、项目名称

纳米电极材料的结构调控与性能优化

二、提名者及提名意见

提名者: 中国科学院合肥物质科学研究院

提名意见: (600 字以内)

该项目系统研究了纳米电极材料的结构调控与性能优化, 攻克了电极材料活性位点密度低、反应动力学迟缓等关键科学难题。取得如下突破性进展: 1) 阐明了主族金属单原子催化剂中的配位环境对电子结构的调控机理, 为高效稳定的催化剂体系设计开辟了新路径; 2) 澄清了催化剂中的层间距与拓扑缺陷对催化性能的影响规律, 揭示了拓扑缺陷对催化反应中间体物种的吸附行为, 进而实现了对催化路径的调控; 3) 阐明了特殊电子态对电荷传输的促进作用, 建立了电极表面结构与离子吸附之间的构效关系, 显著提升了材料储能性能。项目的原创成果得到国内外学术界的广泛关注和高度认可, 5 篇代表性论文被 *Nat. Sustain.*、*Chem. Soc. Rev.* 和 *Adv. Mater.* 等 SCI 期刊共计他引 636 次(单篇最高引用 363 次)。

经研究, “纳米电极材料的结构调控与性能优化” 项目符合安徽省自然科学奖提名条件, 同意提名该项目作为 2025 年度安徽省自然科学奖候选项目。

三、项目简介

该项目属于材料物理与化学、无机化学合成及其与纳米科技的交叉研究领域。项目在国家自然科学基金等项目支持下, 面向国家在新能源领域的重大需求, 围绕纳米电极材料活性位点密度低、反应动力学迟缓等关键科学问题, 系统地开展了纳米电极材料的设计制备、结构调控及电化学性能优化等研究, 取得的主要科学发现如下:

(1) 设计构筑了具有高活性的氧还原反应碳基钙单原子催化剂: 研制了 *s* 区主族金属钙单原子催化剂, 揭示了配位环境对主族金属单原子催化剂电子结构的调控规律, 解决了金属催化位点易发生芬顿反应的难题, 为研发单原子催化剂提供

了新途径；阐明了单原子结构对催化反应关键中间体和反应路径的调控机制，获得了高活性的氧还原反应钙单原子催化剂。

(2) 提出了碳基催化剂的拓扑缺陷构筑策略：发展了利用碱土金属卤素盐插层策略制备高催化活性碳基催化剂的新方法，探究了层间距对碳基催化剂中拓扑缺陷的影响规律，解决了碳基催化剂在酸性氧还原反应中活性低的难题，为研发高效碳基氧还原催化剂提供了新思路；揭示了碳基催化剂中拓扑缺陷对催化反应关键中间体吸附的调控机制，获得了稳定的高活性碳基催化剂，并用于酸性氧还原反应和燃料电池。

(3) 发展了异质原子掺杂调控电极材料电子结构的新方法：揭示了锰掺杂对钌活性位点电子结构的影响规律，提出了对催化反应中电子转移和反应能垒的调控方法，解决了酸性电解质中钌易被氧化的难题；通过异质原子掺杂调控了碳基电极材料的表面电子结构，阐明了电极材料表面特殊电子态促进电子传输的途径，揭示了电极材料表面结构对电化学反应中离子的吸附作用机制，大幅度提升了电极材料储能性能。

项目在纳米电极材料的结构调控与性能优化方面取得的重要成果，得到国际学术界的广泛关注和认可。5 篇代表作包括 *Adv. Mater.* 2 篇、*Adv. Funct. Mater.* 1 篇、*ACS Catal.* 1 篇和 *Chinese J. Chem.* 1 篇，被 *Nat. Sustain.*、*Chem. Soc. Rev.*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Adv. Mater.*、*Angew. Chem. Int. Ed.* 等著名 SCI 期刊他引共计 636 次，单篇最高 SCI 他引 363 次。

代表性论文专著目录（与提名书中所用论文必须一致。）

序号	论文（专著） 名称/刊名 /作者	年卷页 码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	发表 时间 年月 日	通讯作者 (含共 同)	第一作 者(含共 同)	国内作者	论文 署名 单位 是否 包含 国外 单位
1	Tuning the p-Orbital Electron Structure of s-Block Metal Ca Enables a High-Performanc	2021 年 33 卷 2107103 页	2021 年 10 月 11 日	Hui Wang, Qianwang Chen	Zhiyu Lin, Hao Huang	林志宇，黄 浩，程玲，胡 伟，徐鹏平， 杨阳，李建 民，高飞跃， 杨康，刘帅， 江鹏，闫文	否

	e Electrocatalyst for Oxygen Reduction/Advanced Materials/Zhiyu Lin, Hao Huang, Ling Cheng, Wei Hu, Pengping Xu, Yang Yang, Jianmin Li, Feiyue Gao, Kang Yang, Shuai Liu, Peng Jiang, Wensheng Yan, Shi Chen, Changlai Wang, Huigang Tong, Minxue Huang, Wei Zheng, Hui Wang, Qianwang Chen					盛, 陈实, 王长来, 童慧刚, 黄敏学, 郑威, 王辉, 陈乾旺	
2	Constructing Graphitic-Nitrogen-Bonded Pentagons in Interlayer-Expanded Graphene Matrix toward Carbon-Based Electrocatalysts for Acidic Oxygen Reduction Reaction/Advanced Materials/Shuai Liu, Yongchao Zhang, Binghui Ge, Fangcai Zheng, Nan Zhang, Ming Zuo, Yang Yang, Qianwang Chen	2021 年 33 卷 2103133 页	2021 年 8 月 31 日	Qianwang Chen	Shuai Liu	刘帅, 宗此畅, 葛炳辉, 郑方才, 张楠, 左鸣, 杨阳, 陈乾旺	否

3	Modification of Porous N-Doped Carbon with Sulfonic Acid toward High-ICE/Capacity Anode Material for Potassium-Ion Batteries/ Advanced Functional Materials/ Jinwei Tu, Huigang Tong, Xuehao Zeng, Shi Chen, Changlai Wang, Wei Zheng, Hui Wang, Qianwang Chen	2022 年 32 卷 2204991 页	2022 年 6 月 16 日	Qianwang Chen	Jinwei Tu	屠津伟, 童慧刚, 曾学浩, 陈实, 王长来, 郑威, 王辉, 陈乾旺	否
4	Mn-Doped RuO ₂ Nanocrystals as Highly Active Electrocatalysts for Enhanced Oxygen Evolution in Acidic Media/ACS Catalysis/Shi Chen, Hao Huang, Peng Jiang, Kang Yang, Jiefeng Diao, Shipeng Gong, Shuai Liu, Minxue Huang, Hui Wang, Qianwang Chen	2020 年 10 卷 1152-1160 页	2019 年 12 月 13 日	Hui Wang, Qianwang Chen	Shi Chen, Hao Huang, Peng Jiang	陈实, 黄浩, 江鹏, 杨康, 刁洁峰, 龚世鹏, 郑威, 王辉, 陈乾旺	否
5	RuNi Alloy Nanoparticles Encapsulated in	2021 年 39 卷 3455-34	2021 年 9 月 28	Qianwang Chen	Qing Yuan	袁青, 杨阳, 龚世鹏, 陈实, 黄敏学,	否

	Oxygen-doped Carbon as Bifunctional Catalyst towards Hydrogen Electrocatalysis/ Chinese Journal of Chemistry/Qing Yuan, Yang Yang, Shipeng Gong, Shi Chen, Minxue Huang, Changlai Wang, Huigang Tong, Qianwang Chen	61 页	日			王长来, 童慧刚, 陈乾旺	
--	--	------	---	--	--	---------------	--

五、主要完成人（按完成人顺序排列）

王辉、陈实、王长来、刘帅、陈乾旺

六、主要完成单位（按完成单位顺序排列）

（1）第一完成单位：中国科学院合肥物质科学研究院

（2）第二完成单位：中国科学技术大学

七、论证专家

姓名	工作单位	职称	专业领域
孟国文	中国科学院合肥物质科学研究院	研究员	材料科学
张忠平	安徽大学	教授	材料科学
吴长征	中国科学技术大学	教授	无机化学
张海民	中国科学院合肥物质科学研究院	研究员	材料科学
许俊	合肥工业大学	教授	材料物理