

## 附件 3

自然科学奖推荐号：2024-120-2051

<b>项目名称</b>	低成本氧电极催化材料设计及性能提升
<b>提名单位</b>	河北省教育厅
<b>项目简介</b>	<p><b>立项背景：</b></p> <p>氧电极的催化反应(包括氧还原和氧析出)在燃料电池、电解水、金属空气电池等新能源存储转化技术中扮演重要角色。由于涉及多电子转移，动力学缓慢，商业上主要使用贵金属基催化剂(Pt/C、RuO<sub>2</sub>等)，严重制约了相关产业发展。因此，设计开发低成本、高性能的氧电极催化材料具有重要意义。为降低贵金属用量，合金化、纳米化及寻找非贵金属催化材料成为主要的解决方案，其中，催化材料结构、尺寸精准调控及明确催化活性与微观电子结构关系成为提升氧电极催化材料性能的关键，建立催化材料结构/组成-催化活性规律是氧电极催化材料设计的重中之重。本项目针对新型氧电极催化材料可控制备和性能优化中的关键科学问题，设计/调控微观结构，结合第一原理模拟，深入理解催化机制，首次从电子自旋角度构建了催化剂电子结构与催化活性关系，建立了低成本、高活性催化材料设计原则，为研发经济高效型电催化体系夯实理论基础。</p> <p><b>主要研究内容：</b></p> <p><b>(1) 电子自旋调控：</b>率先开展氧电极催化反应中电子转移动力学与电子自旋相关效应关系的研究，以 Fe 基双原子催化材料(Fe/Co-N-C)为模型，通过催化活性中心微环境调控(配位原子种类和配位数)，设计不同自旋极化程度的 Fe 原子活性位点，建立了自旋磁矩-氧还原/氧析出催化活性关系，建立以活性位自旋磁矩为“指示符”进行双效电催化材料设计原则，填补了电催化领域双效催化性能“指示符”研究的空白。</p> <p><b>(2) 传质动力学调控：</b>提出高比表面积多孔碳材料制备新方法，获得了兼具高催化活性及耐久性的碳基氧还原催化材料，为提高非贵金属催化材料综合性能提供了新思路。通过 KOH 活化联合金属离子原位氧化策略，借助低</p>

成本生物质碳源(香蕉皮)自身多孔结构优势, 制备高活性位点密度三维碳纳米结构, 阐明了碳基氧还原催化材料活性及耐久性提升机制。

**(3) 表面吸附能力调控:** 设计构筑高暴露度的多元金属化合物/合金高指数晶面, 利用异核金属价电子耦合作用优化 d 带中心-含氧中间体吸/脱附关系, 建立稳定高指数晶面有效方案。充分利用 Ni 基前驱体的物化性质, 促进高密度高指数晶面形成并提高其稳定性, 有效解决了金属晶体/纳米晶高指数晶面稳定性差的技术难题, 并获得了当时文献报道的最低 Pt 含量合金及优异的催化性能(与商业 Pt/C 相比, 质量活性提升 10 倍, 比活性提升 12 倍)。

### 科学价值:

项目结合实验研究和理论模型, 设计新型三维结构碳、多元金属化合物/合金高指数晶面, 为低成本高性能氧电极催化材料设计夯实了理论基础。执行期间在 Appl.Cataly.B 等期刊发表 SCI 论文 30 篇, 5 篇代表论文引用 560 次(WOS 数据), 其中 Nat. Catal., Adv.Mater.等顶尖期刊给予正面评价, 著名电化学专家俞建勇院士、姚向东教授给予高度评价。

基于项目成果, 王静入选河北省自然科学基金“优秀青年基金”、河北省高等学校“青年拔尖人才计划”, 赵玉峰获皇家化学会会士、河北省自然科学基金“杰出青年基金”, 木士春获科技部中青年科技创新领军人才。

### 代表性论文专著目录

1. Itinerant ferromagnetic half metallic cobalt-iron couples: promising bifunctional electrocatalysts for ORR and OER Journal of Materials Chemistry A, 2019 年 7 期 27175 页
2. Porous polyaniline-derived FeN<sub>x</sub>C/C catalysts with high activity and stability towards oxygen reduction reaction using ferric chloride both as an oxidant and iron source Journal of Materials Chemistry A, 2014 年 2 期 1242 页
3. Three dimensional few-layer porous carbon nanosheets towards oxygen reduction, Applied Catalysis B: Environmental, 2017 年 211 期 148 页
4. High-Indexed PtNi Alloy Skin Spiraled on Pd Nanowires for Highly Efficient Oxygen Reduction Reaction Catalysis, Small, 2019年17期1900288页
5. Phase-pure pentlandite Ni<sub>4.3</sub>Co<sub>4.7</sub>S<sub>8</sub> binary sulfide as an efficient bifunctional electrocatalyst for oxygen evolution and hydrogen evolution, Nanoscale, 2018年10期10459页

### 主要完成人情况表 (排名、姓名、技术职称、工作单位、对本项目技术创造性贡献、曾获奖励情况)

排名	姓名	技术职称	工作单位	完成单位	贡献	曾获奖情况
1	王静	教授	燕山大学	燕山大学	作为项目负责人，提出项目的总体研究思路及主要学术思想。创新性地提出氧电极材料设计的“自旋调控”策略。以理论模型为指引，靶向设计催化材料微结构调控策略，阐明组成/结构-催化活性对应关系，为本项目中催化剂设计提供重要理论支撑和理论延伸，是代表性论文 1 的通讯作者，项目 1 的主持人和主要完成人。	无
2	赵玉峰	教授	上海大学	燕山大学	指导及参与项目总体思想设计及主要学术思想验证；设计构筑多级孔三维碳结构及过渡金属/贵金属合金高指数晶面，解决了高指数晶面高催化活性和高稳定性难以兼得的难题。对项目所有创新点均有贡献。代表性论文 1、2、4 的通讯作者。	2021 年 河北省自然科学奖一等奖 (排名第二)
3	木士春	教授	武汉理工大学	武汉理工大学	开创废弃生物质制备三维多孔碳基复合电极的新成方法，形成三维双连通结构碳的储能机制，揭示不同 N 种类在氧电极催化反应中的不同作用，实现兼具高催化活性及耐久性碳基催化材料。对项目第三个创新点均有重要贡献。代表性论文 2、3 的通讯作者。	2021 年 河北省自然科学奖三等奖 (排名第四)
4	夏美荣	副教授	燕山大学	燕山大学	指导及参与项目理论模型构建及过渡金属化合物高指数晶面设计合成、结构表征及机制研究。对项目第一、三个创新点均有重要贡献。代表性论文 4 的通讯作者，代表性论文 1、5 的共同作者，项目 2 的主持及完成人。	无

### 完成人合作关系说明

本项目成果主要由燕山大学王静、上海大学赵玉峰、武汉理工大学木士春、燕山大学夏美荣等人共同完成。完成人员长期以来开展科研协作，开展高性能氧电极催化剂材料的设计、制备及构效关系研究。完成人在项目中按照各自研究优势合理分工并协同合作，其中王静提出项目总体研究思路、学术思想并参与到各个研究中的理论指导工作。赵玉峰主要参与项目总体思想设计及主要学术思想验证，提出了新型多级孔连通三维碳材料制备新方法，为提高碳基材料本征催化活性提供了新思路，利用过渡金属/贵金属合金化及高指数晶面设计，提出了降低贵金属用量的新方案。木士春主要参与项目中开创低成本生物质碳源制备高活性耐久性三维石墨烯的新方法，实现碳基材料综合性能提升。夏美荣主要参与项目中理论模型设计及过渡金属纳米晶设计，提出高指数晶面 d 电子耦合机制，进

行理论结果分析及过渡金属纳米结构的设计合成、结构表征及机制研究。项目各部分研究具有紧密联系，研究思路、技术手段及表征分析等互相借鉴、逐步提升，研究涉及大量交叉内容及大量合作工作。

项目完成人共同署名完成多篇论文合著，其中代表性论文 1 的由王静、赵玉峰、夏美荣合作完成。其中，赵玉峰同时是代表论文 3，4 的合作者，夏美荣是代表论文 4，5 的合作者。木士春是代表论文 2，3 的合作者。

### 完成人合作关系情况汇总表

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作时间	合作成果	备注
1	论文合著	王静, 赵玉峰, 夏美荣	2017.09-2019.12	Itinerant ferromagnetic half metallic cobalt-iron couples: promising bifunctional electrocatalysts for ORR and OER	
2	论文合著	赵玉峰, 木士春	2013.07-2017.09	Three dimensional few-layer porous carbon nanosheets towards oxygen reduction	
3	论文合著	赵玉峰, 夏美荣	2015.09-2019.12	High-Indexed PtNi Alloy Skin Spiraled on Pd Nanowires for Highly Efficient Oxygen Reduction Reaction Catalysis	
4	论文合著	夏美荣	2016.02-2018.12	Phase-pure pentlandite Ni <sub>4.3</sub> Co <sub>4.7</sub> S <sub>8</sub> binary sulfide as an efficient bifunctional electrocatalyst for oxygen evolution and hydrogen evolution	