**项目公示信息**

项目名称：分子电催化小分子活化基础研究

主要完成单位：陕西师范大学，中国人民大学

主要完成人：曹睿，张伟，郑浩铨，雷海涛，梁作中，李夏亮，谢丽思，齐静，万山红，韩永真，毋艺臻

项目简介：利用光能或电能将水分解成氢气和氧气，是能源转化领域的重要研究方向，其中发展高效稳定的水分解催化剂是研究的热点和难点。近年来，围绕水分解反应，开展了一系列机理研究及性能优化工作。本研究团队在研究方向上具有特色且处于国内外先进水平。在“基于分子催化剂的水分解机理研究”方向上立足世界前沿领域，针对水分解过程中氧氧键和氢氢键的成键机制这个关键科学问题，发展了基于卟啉和咔咯的分子催化剂模型，通过电化学和原位光谱的技术和停流光谱技术研究快速反应，实现了对高活性反应中间体和催化活性物种的监测及催化反应机理研究，揭示了水分解过程中氧氧键和氢氢键的成键机制；在以分子指导异相催化剂设计合成中，设计制备了分子催化剂与异相催化剂高效共催体系及高效过渡金属催化剂，研究了这些催化剂在电催化析氧反应、氧气还原反应等重要能源相关催化反应中的应用，并进一步地组装成金属空气电池等器件。为解决新能源领域相关关键科学问题提供了新的解决思路。上述创新性成果，开拓了利用金属卟啉类模型分子的水分解催化反应机理研究，深化了氢氢成键理论，不但推动了金属卟啉类水分解催化剂的发展，也将对其他类型分子催化剂和固体材料催化剂的理性设计提供重要指导。一方面，在获得高效分子催化剂的基础上，提出并构筑了“分子+连接+纳米阵列”电极体系，拓展了分子电催化在能源领域的应用范围。另一方面，基于这些机理研究成果深化了氢氢/氧氧成键理论，也固体材料催化剂的理性设计提供重要指导，设计并制备了一系列高效的电催化产氧催化剂，为最终实现高效分子电催化在能源及其他领域的应用奠定了基础。这些成果被总结发表在 Angew. Chem. Int. Ed.（5篇），Adv. Mater.（1篇），Adv. Energy Mater.（2篇）等学术期刊上。

主要知识产权目录(8篇代表作及专利、软件著作权等)：

**主要论文专著目录（限8条）**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 论文专著名称  | 刊名 | 第一完成单位（全称） | 作者（填全），英文翻译 | 年卷页码（xx年xx卷xx页） | 发表时间（某年某月） | 通讯作者（中文,按照文中标注的，无标注的不填） | 第一作者（中文） |
| 1 | Hierarchical Co(OH)F superstructure built by low-dimensional substructures for electrocatalytic water oxidation | *Adv. Mater.* | 陕西师范大学 | Shanhong Wan（万山红）, Jing Qi（齐静）, Wei Zhang（张伟）, Weina Wang, Shaokang Zhang, Kaiqiang Liu, Haoquan Zheng（郑浩铨）, Junliang Sun, Shuangyin Wang, Rui Cao（曹睿） | 2017, 29, 1700286 | 2017年6月 | 张伟，曹睿 | 万山红 |
| 2 | Cobalt–nitrogen-doped helical carbonaceous nanotubes as a class of efficient electrocatalysts for the oxygen reduction reaction | Angew. Chem. Int. Ed. | 陕西师范大学 | Zuozhong Liang（梁作中）, Xin Fan, Haitao Lei（雷海涛）, Jing Qi（齐静）, Youyong Li, Jinpeng Gao, Meiling Huo, Haitao Yuan, Wei Zhang（张伟）, Haiping Lin（林海平）, Haoquan Zheng（郑浩铨）, Rui Cao（曹睿） | 2018, 57, 13187-13191 | 2018年8月 | 林海平，郑浩铨，曹睿 | 梁作中 |
| 3 | Carbon nanotubes with cobalt corroles for hydrogen and oxygen evolution in pH 0-14 solutions | Angew. Chem. Int. Ed. | 陕西师范大学 | Xialiang Li（李夏亮）, Haitao Lei（雷海涛）, Jieyu Liu, Xueli Zhao, Shuping Ding, Zongyao Zhang, Xixi Tao, Wei Zhang（张伟）, Weichao Wang, Xiaohong Zheng（郑晓红）, Rui Cao（曹睿） | 2018, 57, 15070-15075 | 2018年8月 | 郑晓红，曹睿 | 李夏亮 |
| 4 | Molecular engineering of a 3D self-supported electrode for oxygen electrocatalysis in neutral media | Angew. Chem. Int. Ed. | 陕西师范大学 | Lisi Xie（谢丽思）, Xialiang Li（李夏亮）, Bin Wang, Jia Meng, Haitao Lei（雷海涛）, Wei Zhang（张伟）, Rui Cao（曹睿） | 2019, 58, 18883-18887 | 2019年10月 | 曹睿 | 谢丽思 |
| 5 | A thin NiFe hydroxide film formed by stepwise electrodeposition strategy with significantly improved catalytic water oxidation efficiency | Adv. Energy Mater. | 陕西师范大学 | Wei Zhang（张伟）, Yizhen Wu（毋艺臻）, Jing Qi（齐静）, Mingxing Chen, Rui Cao（曹睿） | 2017, 7, 1602547 | 2017年1月 | 曹睿 | 张伟 |
| 6 | A nickel-based integrated electrode from an autologous growth strategy for highly efficient water oxidation | Adv. Energy Mater. | 陕西师范大学 | Wei Zhang（张伟）, Jing Qi（齐静）, Kaiqiang Liu, Rui Cao（曹睿） | 2016, 6, 1502489 | 2016年4月 | 张伟，曹睿 | 齐静 |
| 7 | Fast and simple preparation of iron-based thin films as highly efficient water-oxidation catalysts in neutral aqueous solution | Angew. Chem. Int. Ed. | 中国人民大学 | Yizhen Wu（毋艺臻）, Mingxing Chen, Yongzhen Han（韩永真）, Hongxia Luo, Xiaojun Su, Ming-Tian Zhang, Xiaohuan Lin, Junliang Sun, Lei Wang, Liang Deng,Wei Zhang（张伟）, Rui Cao（曹睿） | 2015, 54, 4870-4875 | 2015年2月 | 曹睿 | 毋艺臻 |
| 8 | Singly versus doubly reduced nickel porphyrins for proton reduction: experimental and theoretical evidence for a homolytic hydrogen-evolution reaction | Angew. Chem. Int. Ed. | 中国人民大学 | Yongzhen Han（韩永真）, Huayi Fang, Huize Jing, Huilin Sun, Haitao Lei（雷海涛）, Wenzhen Lai（赖文珍）, Rui Cao（曹睿） | 2016, 55, 5457-5462 | 2016年3月 | 赖文珍，曹睿 | 韩永真 |

**主要知识产权证明目录（限10条）**

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 知识产权类别 | 知识产权具体名称 | 国家（地区） | 授权号 | 授权日期 | 证书编号 | 权利人 | 发明人 |
| 发明专利 | 一种电催化全分解水产氢产氧的卡斯特泡沫镍的制备方法 | 中国 | ZL201810243134.4 | 2020-4-24 | 3767407 | 陕西师范大学 | 张伟;高学庆;曹睿 |
|  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |