

## 自然科学奖公示：

项目名称	纳米催化的微观作用机制
提名者	中国科学院沈阳分院
提名意见	<p><b>三大奖提名意见参考格式（不超过600字）：</b></p> <p>纳米催化是纳米材料与多相催化学科交叉的研究热点，其化学本质是在原子尺度鉴别和调控催化剂活性位结构，提高催化反应效率。本项目基于针对能源和环境相关的重要催化剂体系和反应过程，以纳米结构氧化物为重点，系统研究了催化剂粒子尺寸、形貌等对活性位原子结构和催化性能的影响规律，提出并发展了“纳米催化的形貌效应”的科学内涵。通过在纳米尺度精确调控氧化物粒子形貌，实现了活性晶面的优先暴露和催化活性位点的表面富集，大幅度提高了催化反应性能，建立了催化剂粒子形貌及表面原子结构与性能的关联。基于氧化物形貌效应和金属粒子尺寸效应，利用氧化物负载金属纳米粒子/原子簇，构筑新型金属-氧化物界面，定量描述了金属-载体界面原子排布(几何结构)和化学状态(电子结构)对催化反应性能的作用机制，深化了金属-载体相互作用机制的科学认知。利用原位动态谱学及电镜技术表征反应条件下的催化剂粒子结构及活性位动态演变行为，建立了反应条件下的催化剂构-效关系。总之，该项目围绕纳米催化材料的尺寸、形貌、晶相、界面结构调控，从纳米、原子层次理解纳米催化的微观作用机制，建立多相催化的构-效关系，为设计和制备新型高效催化剂提供了理论基础和实践探索。</p> <p>相关成果发表在 Nature 等核心学术期刊上，8 篇代表性论文被他人引用 2734 次；研究团队主要人员应邀在国际、国内催化学术会议上做大会报告、邀请报告 10 次；阐述了纳米催化作用机理的化学本质，居国际纳米催化领域前沿。</p> <p>提名该项目为辽宁省自然科学奖一等奖。</p>
项目简介	<p>纳米结构催化剂的设计与制备是多相催化反应的核心。传统的催化剂制备方法是通过减小粒子尺寸以提高其表面暴露的活性位数目，即纳米催化中的尺寸效应。但是这种方法往往带有很大程度的经验性和随机性。近年来，申请人团队重点开展了“纳米催化的微观作用机制”的研究，提出并验证了纳米催化的形貌效应；通过在纳米尺度调控催化剂粒子形貌，选择性暴露高活性的晶面，提高表面活性位密度，大幅提升了其在能源和环境催化过程中的反应活性、选择性和稳定性。取得如下创新成果：</p> <p>(1) 提出并验证了纳米催化的形貌效应。Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>纳米棒暴露高活性{110}晶面，由于该晶面配位的Co<sup>3+</sup>是CO氧化反应的活性位，即使在-77 °C仍可以实现CO的完全转化，并具有很高的催化稳定性。相关工作发表在Nature上，他引次数达1539次。以此为基础，研究了系列金属氧化物(Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、CeO<sub>2</sub>、TiO<sub>2</sub>、MoO<sub>3</sub>、MnO<sub>x</sub>、MgO、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>等)纳米结构(纳米棒、立方体、纳米片等)特征及催化形貌，验证并深化了纳米催化的形貌效应。</p> <p>(2) 构筑新型金属-氧化物界面结构。利用氧化物的形貌效应构筑了具有特定纳米结构的负载型金属催化剂，大幅提升了其催化性能。利用CeO<sub>2</sub>纳米棒表面的氧空穴稳定2-4 nm的金粒子，明确了Au-CeO<sub>2</sub>界面原子结构及催化性能；在优先暴露{110}晶面的La<sub>2</sub>O<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>纳米棒催化剂上实现了5 nm铜粒子的取向落位，在一级醇氢转移脱氢反应中表现出优异的活性和选择性。此外，利用氧化物形貌制备了高效Pt/MnO<sub>x</sub>-CeO<sub>2</sub>、Cu/CeO<sub>2</sub>、Au/Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Ir/CeO<sub>2</sub>等催化剂，验证了特定金属-氧化物界面结构对催化性能的促进作用。</p> <p>通过上述工作的开展，从氧化物纳米粒子形貌效应和利用氧化物形貌调变金属-载体界面结构等角度深化了对纳米催化作用机制的科学认知，引领纳米催化研究热</p>

	点。8 篇代表性论文，总被引用 2734 次。应邀在 Chemical Society Reviews 等刊物上撰写综述文章，在国际、国内重要学术会议上做大会报告、邀请报告 10 次。系统归纳总结了金属及氧化物催化剂的尺寸、形貌可控制备技术、暴露晶面的原子结构特征及调控机制、催化反应性能等，深化了对催化剂本征构-效关系和活性位原子结构的理解，为创制新型高效催化剂体系奠定了材料基础和理论认知。								
主要完成人（完成单位）	完成人按照排名顺序填写（不超过 5 人） 1. 申文杰（中国科学院大连化学物理研究所） 2. 李勇（中国科学院大连化学物理研究所） 3. 周燕（中国科学院大连化学物理研究所）								
代表性论文（专著）目录（不超过 8 篇）									
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	他引总次数	检索数据库	论文署名单位是否包含国外单位
1	Low-temperature oxidation of CO catalysed by Co <sub>3</sub> O <sub>4</sub> nanorods / <b>Nature</b> / Xiaowei Xie, Yong Li, Zhi Quan Liu, Masatake Haruta, Wenjie Shene	458 (2009) 746-749	2009 年 4 月 9 日	Wenjie Shene	Xiao wei Xie, Yong Li	谢晓伟, 李勇, 刘志权, 申文杰	1539	Science Citation Index Expanded	是
2	Rod-shaped Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> as an efficient catalyst for the selective reduction of nitrogen oxide by ammonia / <b>Angewandte Chemie International Edition</b> / Xiaoling Mou, Bingsen Zhang, Yong Li, Lide Yao, Xuejiao Wei, Dang Sheng Su, Wenjie Shen	51 (2012) 2989-2993	2012 年 2 月 6 日	Dang Sheng Su, Wenjie Shen	Xiaoling Mou	牟效玲, 张炳森, 李勇, 魏雪姣, 苏党生, 申文杰	169	Science Citation Index Expanded	是
3	MnOx-CeO <sub>2</sub> mixed oxide catalysts for complete oxidation of	62 (2006)	2006 年 2 月 22 日	Wenjie Shen	Xingfu Tang	唐幸福, 李永刚,	378	Science Citat	否

	formaldehyde: Effect of preparation method and calcination temperature / <b>Applied Catalysis B-Environmental</b> / Xingfu Tang, Yonggang Li, Xiumin Huang, Yide Xu, Huaqing Zhu, Jianguo Wang, Wenjie Shen	265-273				黄秀敏, 徐奕德, 朱华青, 王建国, 申文杰		ion Index Expanded	
4	Stabilized gold nanoparticles on ceria nanorods by strong interfacial anchoring / <b>Journal of the American Chemical Society</b> / Ta Na , Jingyue (Jimmy) Liu, Santhosh Chenna, Peter A. Crozier, Yong Li, Aling Chen, Wenjie Shen	134 (2012) 2058-2058	2012年12月26日	Jingyue (Jimmy) Liu, Wenjie Shen	Tana	塔娜, 李勇, 陈阿玲, 申文杰	193	Science Citation Index Expanded	是
5	Hydrogen production from ethanol over Ir/CeO <sub>2</sub> catalysts: A comparative study of steam reforming, partial oxidation and oxidative steam reforming / <b>Journal of Catalysis</b> / Weijie Cai, Fagen Wang, Ensheng Zhan, A.C. Van Veen, Claude Mirodatos, Wenjie Shen	257 (2008) 96-107	2008年7月1日	Wenjie Shen	Weijie Cai	蔡伟杰, 王发根, 展恩胜, 申文杰	110	Science Citation Index Expanded	是
6	Highly efficient dehydrogenation of primary aliphatic alcohols catalyzed by Cu nanoparticles	3 (2013) 890-894	2013年4月9日	Zhi-Quan Liu, Can Li,	Fei Wang	王非, 师瑞娟, 刘志权, 尚攀	62	Science Citation Index	否

	dispersed on rod-shaped $\text{La}_2\text{O}_2\text{CO}_3$ / <b>ACS Catalysis</b> / Fei Wang, Ruijuan Shi, Zhi-Quan Liu, Pan-Ju Shang, Xueyong Pang, Shuai Shen, Zhaochi Feng, Can Li, Wenjie Shen			Wenjie Shen		举, 庞学勇, 沈帅, 冯兆池, 李灿, 申文杰		x Expanded	
7	Morphology-dependent nanocatalysts: Rod-shaped oxides / <b>Chemical Society Reviews</b> / Yong Li, Wenjie Shen	43 (2014) 1543-1574	2014年3月7日	Wenjie Shen	Yong Li	李勇, 申文杰	267	Science Citation Index Expanded	否
8	Shape engineering of oxide nanoparticles for heterogeneous catalysis / <b>Chemistry-An Asian Journal</b> /Yan Zhou, Yong Li, Wenjie Shen	11 (2016) 1470-1488	2016年5月20日	Wenjie Shen	Yan Zhou	周燕, 李勇, 申文杰	16	Science Citation Index Expanded	否

**承诺:** ①本项目所列知识产权符合提名要求且无争议。②已明确告之上述论文(专著)所有作者: 所列论文(专著)用于提名2020年辽宁省自然科学奖, 项目如获奖后, 所列论文(专著)不得再次参评省部级科技奖, 如未获奖, 所列论文(专著)再次参评须间隔一年。③未列入项目主要完成人的第一作者、通讯作者(含共同第一作者、共同通讯作者)已出具知情同意书面签字意见, 与其他作者的有关知情证明材料均存档备查。④如因上述事项引发争议, 将积极配合调查处理并承担相应责任。