

安徽省科学技术奖提名项目公示内容

(自然科学奖, 2025 年度)

一、项目名称

光/电催化固氮基础与应用研究

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)

氨与尿素对于农业和化工生产至关重要。近几年, 常温常压光/电催化固氮合成氨与尿素已成为国际前沿研究热点, 被认为是传统高能耗、高污染的哈勃-博施(Haber-Bosch)与博施-迈泽(Bosch-Meiser)工艺的理想替代技术。项目组在国家自然科学基金面上等项目的支持下, 围绕高效光/电催化固氮催化剂活性位的调控、新型反应体系的构建、以及氮气(N_2)吸附活化、N-H 键形成与 C-N 偶联反应中存在关键科学与技术问题, 结合大科学装置表征技术与理论计算等手段, 深入地揭示了光/电催化 N-H 与 C-N 键形成新机制与新路径, 取得了系列原创性成果。发现了含氮光/电催化剂中关键氮物种对于 N_2 还原合成氨的作用机制, 澄清了光/电催化固氮合成氨中氮的来源问题; 发展了生物质衍生碳基氧配位金属原子级催化剂的普适性制备方法, 为电催化合成氨与尿素奠定了材料基础; 突破了负载型电催化剂固定界面限制, 构建了高效流态式电催化固氮反应新体系, 为含氮复合水肥的绿色制备提供了潜在应用基础。研究成果对于推动人工固氮技术的发展, 提高氮资源的高效利用提供了重要理论指导与科学依据。

该项目 6 篇代表性论文他引 1280 次, ESI 高被引论文 4 篇, 单篇他引超过 100 次论文 5 篇, 1 篇在国内期刊(*Inorganic Chemistry Frontiers*)上发表, 获授权中国和欧洲专利 5 项。

经研究, “光/电催化固氮基础与应用研究”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 年安徽省自然科学奖候选项目。

三、项目简介

本项目属于无机非金属催化材料、纳米科技与能源环境化学交叉领域。常温常压光/电驱动氮气 (N_2) 还原制氨和碳-氮偶联合成尿素, 可显著降低传统工艺过程的能耗与碳排放, 但仍面临 $\text{N}=\text{N}$ 键活化困难、副反应竞争、活性位动态演化及气液传质受限等巨大挑战。在国家自然科学基金面上项目等支持下, 项目团队以常温常压光/电催化固氮高效合成氨与尿素为目标, 发展了高效光/电催化固氮活性位调控新原理与新方法, 系统地探究了原子级活性位点构筑、局域电子调控、反应态配位与电子结构演化及界面传质强化等对 $\text{N}-\text{H}$ 和 $\text{C}-\text{N}$ 键形成的影响规律和机制, 设计并构建了新型流态式电催化反应体系, 取得了系列突破性进展。该项目重要发现点如下:

1、发现了含氮光/电催化剂中关键氮物种对于 N_2 还原合成氨的作用机制, 明确了催化剂中内源氮与外源 N_2 对合成氨的贡献, 澄清了光/电催化固氮合成氨中氮的来源问题。中国科学院化学研究所赵进才院士团队在国际能源环境期刊综述论文中 (*Energy Environ. Sci.*, 2020, 13, 2602.) 对有关研究进行了正面评述。天津大学姜忠义教授团队在国际著名化学领域综述期刊论文中 (*Chem. Soc. Rev.*, 2023, 52, 6938.) 将有关成果列为氮化碳光催化固氮研究的代表性论文之一, 并进行大篇幅正面评述。

2、建立了利用生物质表面含氧官能团吸附限域作用可控制备原子级金属催化剂的普适性方法, 解析了氧配位单、双原子局域电子结构, 揭示了活性位点协同与工作状态重构调控 N_2 活化与 $\text{C}-\text{N}$ 偶联新机制。德国科学院院士 Matthias Beller 教授在国际著名化学领域综述期刊论文中 (*Chem. Rev.*, 2021, 121, 13620.) 将有关成果列为铁单原子固氮电催化剂研究的代表性论文之一, 并进行大篇幅正面评述。中国科学院院士、发展中国家科学院院士、欧洲科学院外籍院士成会明研究员在国际著名化学领域综述期刊论文 (*Chem. Soc. Rev.*, 2025, 54, 4567.) 中从电催化剂的设计、制备及其合成尿素性能等方面给出了正面评述。

3、突破了负载型电催化剂固定界面限制, 构建了高效流态式电催化固氮反应新体系, 为含氮复合水肥的绿色制备提供了潜在应用基础。美国纽约州立大学布法罗分校 Gang Wu 教授等在发表的综述论文中 (*Small Struct.*, 2023, 4, 2200202.), 充分肯定了缺陷工程与反应器强化相结合提升反应效率的设计思想。昆明理工大学包桂蓉教授团队在发表的综述论文中 (*Ind. Eng. Chem. Res.*, 2025, 64, 15205.), 引用项目 4 篇论文对流态式电催化体系从基础研究到潜在应用进行了正面评述。

该项目 6 篇代表性论文他引 1280 次, 其中 ESI 高被引论文 4 篇, 1 篇在国内期刊 (*Inorg. Chem. Front.*) 上发表; 获授权中国和欧洲专利 5 项, 成果被 *Nat. Nanotechnol.*、*Nat. Chem.*、*Nat. Mater.*、*Chem. Soc. Rev.* 等期刊引用和评价。

四、代表性论文专著目录

序号	论文（专著）名称/刊名/作者	年卷页码 （xx 年 x 卷 x 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	Potassium-Ion-Assisted Regeneration of Active Cyano Groups in Carbon Nitride Nanoribbons: Visible-Light-Driven Photocatalytic Nitrogen Reduction/Angewandte Chemie International Edition/Weikang Wang, Haimin Zhang, Shengbo Zhang, Yanyan Liu, Gguozhong Wang, Chenghua Sun, Huijun Zhao	2019 年 58 卷 16644-16650 页	2019 年 10 月 01 日	Haimin Zhang, Chenghua Sun, Huijun Zhao	Weikang Wang	王伟康，张海民，张圣波，刘艳艳，汪国忠	是

2	Ambient Electrosynthesis of Ammonia on a Biomass-Derived Nitrogen-Doped Porous Carbon Electrocatalyst: Contribution of Pyridinic Nitrogen/ACS Energy Letters/Cuijiao Zhao, Shengbo Zhang, Miaomiao Han, Xian Zhang, Yanyan Liu, Wenyi Li, Chun Chen, Guozhong Wang, Haimin Zhang, Huijun Zhao	2019 年 4 卷 377-383 页	2019 年 01 月 02 日	Miaomiao Han, Haimin Zhang	Cuijiao Zhao, Shengbo Zhang	赵翠娇, 张圣波, 韩苗苗, 张显, 刘艳艳, 李文怡, 陈春, 汪国忠, 张海民	是
---	---	----------------------	------------------	----------------------------	-----------------------------	---	---

3	Electrocatalytically Active Fe-(O-C ₂) ₄ Single-Atom Sites for Efficient Reduction of Nitrogen to Ammonia/Angewandte Chemie International Edition/Shengbo Zhang, Meng Jin, Tongfei Shi, Miaomiao Han, Qiao Sun, Yue Lin, Zhenhua Ding, Li Rong Zheng, Guozhong Wang, Yunxia Zhang, Haimin Zhang, Huijun Zhao	2020 年 59 卷 13423-13429 页	2020 年 05 月 27 日	Yue Lin, Haimin Zhang, Huijun Zhao	Shengbo Zhang, Meng Jin, Tongfei Shi,	张圣波, 金梦, 史同飞, 韩苗苗, 孙巧, 林岳, 丁振华, 郑黎荣, 汪国忠, 张云霞, 张海民	是
---	---	---------------------------	------------------	------------------------------------	---------------------------------------	--	---

4	Atomically Dispersed Bimetallic Fe-Co Electrocatalysts for Green Production of Ammonia/Nature Sustainability/ Shengbo Zhang, Miaomiao Han, Tongfei Shi, Haimin Zhang, Yue Lin, Xusheng Zheng, Lirong Zheng, Hongjian Zhou, Chun Chen, Yunxia Zhang, Guozhong Wang, Huajie, Yin, Huijun Zhao	2023 年 6 卷 169-179 页	2022 年 11 月 14 日	Haimin Zhang, Huijun Zhao	Shengbo Zhang, Miaomiao Han, Tongfei Shi,	张圣波, 韩苗苗, 史同飞, 张海民, 林岳, 郑旭升, 郑黎荣, 周宏建, 陈春, 张云霞, 汪国忠, 尹华杰	是
---	--	----------------------	------------------	---------------------------	---	--	---

5	Ambient Electrosynthesis of Urea with Nitrate and Carbon Dioxide over Iron-Based Dual-Sites/Angewandte Chemie International Edition/Jing Geng, Sihan Ji, Meng Jin, Chao Zhang, Min Xu, Guozhong Wang, Changhao Liang, Haimin Zhang	2023 年 62 卷 e202210958 页	2023 年 01 月 09 日	Changhao Liang, Haimin Zhang	Jing Geng, Sihan Ji	耿竞, 计思涵, 金梦, 张超, 胥敏, 汪国忠, 梁长浩, 张海民	否
---	--	--------------------------	------------------	------------------------------	---------------------	------------------------------------	---

6	Electrochemical Reduction of Nitrate to Ammonia in a Fluidized Electrocatalysis System with Oxygen Vacancy-Rich CuO _x Nanoparticles /Inorganic Chemistry Frontiers/Jing Geng, Sihan Ji, Hui Xu, Cuijiao Zhao, Shengbo Zhang, Haimin Zhang	2021 年 8 卷 5209-5213 页	2021 年 10 月 07 日	Shengbo Zhang, Haimin Zhang	Jing geng, Sihan Ji	耿竞, 计思涵, 徐晖, 赵翠娇, 张圣波, 张海民	否
---	--	------------------------	------------------	-----------------------------	---------------------	----------------------------	---

五、主要完成人（按完成人顺序排列）

张海民, 尹华杰, 耿竞, 张圣波, 李文怡

六、主要完成单位（按完成单位顺序排列）

中国科学院合肥物质科学研究院

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	材料物理化学
蔡伟平	中国科学院合肥物质科学研究院	研究员	材料物理化学
费广涛	中国科学院合肥物质科学研究院	研究员	材料物理化学
汪国忠	中国科学院合肥物质科学研究院	研究员	材料物理化学
吴明在	安徽大学	教授	材料科学与工程