

姓 名	段志遥	性 别	男	出生年月	1983 年 8 月	照片 
出生地	大连	婚姻状况	已婚	政治面貌	群众	
国 籍	中国	从事专业	计算催化			
现工作单位及职位		德州大学奥斯汀分校化学系博士后				
人事关系所在单位		无				

学习及工作经历：
（从大学开始填，内容包括时间、单位、学位、所学专业、从事专业、专业技术职务情况，时间段要连续，准确到月份）

2002-2006 武汉大学物理系 应用物理专业 学士学位

2006-2009 武汉大学物理系 凝聚态物理专业 硕士学位

2009-2013 匹兹堡大学材料科学与工程系 材料科学专业 博士学位

2013 至今 德克萨斯大学奥斯汀分校化学系 博士后

主要学术成就、科技成果及创新点：

我的科研主要集中在用多尺度计算方法研究催化剂的结构和催化的反应机理，建立催化剂结构和性质（包括活度、选择性、稳定性等）之间的关系，以求解释实验中观察到的现象并进行一定程度的预测来为实验指出方向。目前为止，我的研究领域包括几个大的方向：

1. 用蒙特卡洛方法表征合金催化剂的表面结构（发表文章 4 篇，引用数 87）

铂合金可以提高铂催化剂对氧气还原反应（ORR）的催化活度和稳定性。催化性质的提高和合金的表面结构直接相关。由于表面偏析（surface segregation）和表面有序（surface ordering）等效应的影响，合金的表面的元素组成和排列会和体结构会有很大的不同。实验上对合金催化剂表面结构的表征很难达到原子精度。在该项目中，我开发了描述多个铂合金原子间相互作用的经验势能，并利用蒙特卡洛模拟（MC）来研究铂合金表面的结构。通过该方法，可以对合金的表面结构达到原子细节上的认知。从而理解合金对催化性质的影响。研究过的体系有 Pt-Ti, Pt-Co, Pt-Fe, Pt-Pd 和 Pt-Au。下面简单介绍一下该项目的部分结果。

实验上 Pt₃Co 和 Pt₃Fe 合金都会提高纯 Pt 催化剂的活度。在这两种合金中，Pt 有很强的表面偏析倾向。当 Pt 在合金中的组分高于 75% 时，合金表面会形成一层纯 Pt 层，而第二层会富集 Co 或 Fe。由于这种表面结构，第二层的 Co 或 Fe 会改变第一层 Pt 的电子结构，使得 O 原子的吸附变弱，从而提高 ORR 反应的速率。纯 Pt 表面也会保护第二层的 Co 或 Fe，避免它们被氧化。

实验上发现在 Pt 里掺杂少量的 Au 会提高 Pt 催化剂的稳定性。通过模拟发现，Pt 纳米颗粒在氧化性的电化学环境中（高酸度高电势）会逐渐溶解。Pt 的溶解从 Pt 纳米颗粒表面上的低配位数的位置开始。而掺杂的 Au 会有很强的表面偏析从而占领这些表面上低配位数的位置。因为 Au 很难被氧化溶解，所以保护了这些低配位数的位置，避免纳米颗粒催化剂的溶解。

2. 铂合金上 ORR 反应机理（发表文章 3 篇，引用数 105）

在上一个项目中在，我表征了铂合金催化剂的表面结构。在该结果的基础上，我进一步用密度泛函理论（DFT）研究了 ORR 在铂合金表面上的反应机理。通过对反应机理的研究解释了为什么铂合金催化剂（Pt₃Ni, Pt₃Co, Pt₃Fe, Pt₃Ti）的催化效率要高于纯铂催化剂。

通过计算发现纯铂表面上会形成吸附的氧原子，而由于氧原子的吸附比较强，氧原子的还原有比较高的能垒是 ORR 反应的决速步。在合金表面上，由于第二层的 3d 过渡金属和纯铂表面的相互作用，使得反应中间体在表面的吸附变弱。使得氧原子的还原变得更容易从而提高了催化效率。不仅如此，在合金表面上，吸附的氧气还有可能直接形成过氧化氢，从而避免了形成吸附较强的氧原子，这会使得决速步改变、能垒大大降低。

另外我还发现，第二层 3d 过渡金属的影响的强弱和晶面有很强的关联。在（111）表面上，过渡金属对表面 Pt 的电子结构的影响要远远大于在（100）上的影响。通过计算发现，反应中间体的

吸附能在纯铂和合金表面并没有很大的变化。ORR 的反应决速步和能垒也保持不变。这种掺杂效果对晶面结构的依赖和实验结果一致。

此外，我还编写了动力学蒙特卡洛（KMC）程序。KMC 以 DFT 计算的基本反映步最为输入，研究众多基本反应之间相互竞争相互协作的动态过程。在纯铂表面，KMC 计算显示氧原子会在铂表面上积累，阻碍了反应的进行。而铂合金表面基本保持干净，从而有更高的催化活性。

3. 金纳米颗粒/氧化物界面上的催化反应机理（发表文章 2 篇，引用数 10）

金纳米颗粒/氧化物催化剂可以在低温下催化 CO 氧化反应。从发现至今三十多年以来，对该催化反应的反应机理和反应活性位一直有不同的观点。在最近研究中，我建立了一个更符合实际的原子模型，对该反应的活性点位和反应机理有新的见解。研究的体系包括 Au/TiO₂ 和 Au/MgO。因为 CO 可以吸附在 Au 纳米颗粒上，对该反应的理解主要着重在 O₂ 的活化。

在 Au/TiO₂ 体系中，通过密度泛函计算发现，O₂ 的活化在 TiO₂ 表面和 Au 纳米颗粒上都不会发生。而界面上的 Au/Ti_{5c} 位置可以非常有效地活化、解离 O₂ 分子。而吸附在 Au/Ti_{5c} 位置上的氧原子会很容易的与纳米颗粒上吸附的 CO 反应。这个 O₂ 活化的活性位是一个新的发现。这个活性位的产生是因为 Ti 阳离子会使电子在 Au/Ti_{5c} 之间聚集（该效应类似于镜像电荷），在这个位置吸附的 O₂ 可以很容易地得电子，从而被活化。该发现解释了实验上对活性氧的一些最新发现。Behm 组最近发现在 Au/TiO₂ 上发生的 CO 氧化反应中的活性氧是在界面上吸附的氧原子，因为活性氧有很强热稳定性。这和计算的结果相符。

在 Au/MgO 体系中，O₂ 的活化与 Au/TiO₂ 不同。Au 和 MgO 接触之后，Au 表面上的电子会重新组织：电子从 O 阴离子上方转移到 Mg 阳离子的上方（镜像电荷效应）。由于电子聚集区和电子消耗区的位置不重合，所以形成了表面的电偶极子。该电偶极子降低了 Au 表面的功函数，形成所谓的“热”电子。“热电子”可以转移到在界面吸附的 O₂ 分子上从而活化 O-O 键。但是由于 MgO 不是可还原的氧化物，所以并不能解离 O₂。所以吸附的 O₂ 可以和 Au 纳米颗粒上吸附的 CO 直接反应。

4. 催化条件对催化剂的影响（发表文章 1 篇，引用数 6）

在研究催化反应机理时，一般都假设催化剂表面结构不变。以在 Pd 表面上的 CO 氧化为例。一般以为，CO 和 O 吸附在 Pd 表面，从而进行反应。这种观点在反应物气体分压很低的时候是正确的。但当气体分压提高时，Pd 可能会和反应气体先进行反应，造成表面形态的变化。例如，当氧气分压高时 Pd 表面可能会首先被氧化而 CO 的氧化是在 Pd 氧化物上进行的。

在这部分研究里，我研究了 Pd 催化剂在氧气富集气氛下的表面结构和 CO 氧化的反应机理。计算表明当氧气分压逐渐提高时，Pd 表面会经历干净 Pd 表面、O 原子吸附态、Pd₅₀₄ 表面氧化物和 PdO 体氧化物四种形态。在实际的反应条件下，Pd₅₀₄ 表面氧化物是最稳定的。在 CO 氧化反应中，如果氧气分压很低，那么 CO 会占据 Pd 表面导致氧化反应难于进行。氧气分压过高时，表面会形成一层稳定的表面氧化物，改氧化物表面对 CO 的吸附能力很弱，也导致反应进行不快。所以，存在

一个氧气分压，使得表面氧化物和 CO 吸附两种状态的稳定下相似。这样 CO 氧化反应就可以在这两个态的界面上进行反应。提高催化效率。而在 Goodman 组的实验中，确实发现在一定氧气分压下存在一个超高活性的催化状态。

5. 模拟广延X射线吸收精细结构 (EXAFS) 来确定催化剂结果 (发表文章 1 篇)

EXAFS 是结构表征的重要手段。但是在结构无序性大的时候，对 EXAFS 光谱的分析得到的结构参数并不可靠，而且并不能精确确定原子结构。例如，很小的金属纳米颗粒，由于表面弛豫，配体效应等，结构存在很大的无序性，结构也可能和对应的体结构有很大不同。从计算上可以得到精确的原子结构和相对应的 EXAFS 谱线。如果能在计算中找到一个结构的谱线和实验的谱线吻合，那么就可以更精确地表征小金属纳米颗粒的结构。在该项目中，我们计算组与 Dr. Richard Crooks (合成树枝状封装纳米颗粒) 和 Dr. Anatoly Frenkel (EXAFS 实验测量) 合作，通过对比模拟和实验的 EXAFS 谱线来精确表征金属纳米颗粒的结构。通过比较发现，Au₁₄₇ (~1.6nm) 纳米颗粒的结构是十二面体结构 (icosahedron) 而不是通常的 FCC 结构。

主要论著目录:

(1. 论文作者、题目、期刊名称、年份、卷期、页、总引次数、他引次数、期刊影响因子; 2. 著作: 著者、书名、出版社、年份)

目录列表最后请注明论文总引次数、他引次数、期刊影响因子的查询截止时间和查询数据库。

1. Z. Duan, Y. Li, J. Timoshenko, S. T. Chill, R. M. Anderson, D. F. Yancey, A. I. Frenkel, R. M. Crooks and G. Henkelman, "Combined theoretical and experimental EXAFS study of the structure and dynamics of Au₁₄₇ nanoparticles", Catalysis Science and Technology (2016), DOI: 10.1039/C6CY00559D. IF: 5.426
2. Z. Duan, and G. Henkelman, O₂ activation at the Au/MgO(001) interface boundary facilitates CO oxidation, Physical Chemistry Chemical Physics (2016), 18, 5486. IF:4.493
3. H. Fu, Z. Duan (通讯作者), and G. Henkelman, Computational Study of Structure and Reactivity of Oligomeric Vanadia Clusters Supported on Anatase and Rutile TiO₂ Surfaces, The Journal of Physical Chemistry C (2015), 119, 15160-15167. IF:4.772
4. Z. Duan, G. Henkelman, "CO Oxidation at the Au/TiO₂ Boundary: The Role of the Au/Ti_{5c} Site", ACS Catalysis (2015), 5, 1589-1595. IF:9.312
5. Z. Duan, G. Henkelman, "CO Oxidation on the Pd(111) Surface", ACS Catalysis (2014), 4, 3435-3443. IF:9.312
6. Y. Sun, J. Liu, D. Blom, G. Koley, Z. Duan, G. Wang, X. Li, Atomic-scale imaging correlation on the deformation and sensing mechanisms of SnO₂ nanowires, Applied Physics Letters (2014), 105, 243105. IF:3.302
7. S. Kattel, Z. Duan, G. Wang, Density Functional Theory Study of an Oxygen Reduction Reaction on a Pt₃Ti Alloy Electrocatalyst, The Journal of Physical Chemistry C (2013), 117, 6284-6292. IF:4.772
8. Z. Duan, G. Wang, Comparison of reaction energetics for oxygen reduction reactions on Pt(100), Pt(111), Pt/Ni(100), and Pt/Ni(111) surfaces: A first-principles study, The Journal of Physical Chemistry C (2013), 117, 7107-7113. IF:4.772
9. Y. Lei, Y. Gong, Z. Duan, G. Wang, Density functional calculation of activation energies for lattice and grain boundary diffusion in alumina, Physical Review B

(2013), 87, 214105. **IF:3.664**

10. C. Wang, D. Li, M. Chi, J. Pearson, B. Rankin, J. Greeley, Z. Duan, G. Wang, D. van der Vliet, K. L. More, N. M. Markovic, and V. R. Stamenkovic, Rational Development of Ternary Alloy Electrocatalysts, The Journal of Physical Chemistry Letters (2012), 3, 1668 – 1673. **IF:7.458**

11. A. Datta, Z. Duan, G. Wang, Influence of surface segregation on the elastic property of Pt-Ni alloy nanowires, Computational Material Science (2012), 55, 81. **IF:2.131**

12. Z. Duan, G. Wang, Monte Carlo simulation of surface segregation phenomena in extended and nanoparticle surfaces of Pt-Pd alloys, Journal of Physics: Condensed Matter (2011), 23, 475301. **IF:2.346**

13. Z. Duan, G. Wang, A first principles study of oxygen reduction reaction on a Pt(111) surface modified by a subsurface transition metal M (M = Ni, Co, or Fe), Physical Chemistry Chemical Physics (2011), 13, 20178. **IF:4.493**

14. Y. Zhang, Z. Duan, X. Chan, G. Wang, Density functional theory calculation of platinum surface segregation energy in Pt₃Ni (111) surface doped with a third transition metal, Surface Science (2011), 605, 1577. **IF: 1.925**

15 Z. Duan, J. Zhong, G. Wang, Modeling surface segregation phenomena in the (111) surface of ordered Pt₃Ti crystal, Journal of Chemical Physics (2010), 133, 114701. **IF: 2.952**

16 Z. Duan, W. Xiao, Cu dimer diffusion on strained Cu(001), Surface Science (2010), 604, 337. **IF:1.925**

总引用次数: 235 次 (google scholar)

总他引次数: 约 210 次

影响因子查询截止时间: 2015 年

查询数据库: <http://www.journal-database.com/>

主持(参与)科研项目及申请专利：
(项目来源、项目名称、经费、个人在其中的作用)

获科技奖情况：

（项目名称、奖项、获奖时间、本人在其中的作用及排名、获奖总人数）

获各类荣誉奖情况：

2004 年武汉大学二等学生奖学金

2012 年匹兹堡大学材料系最佳助研

受聘后拟开展研究工作的计划和思路（包括研究方向、内容和目标）：

受聘后将在以前工作的基础上继续利用理论计算工具深入研究催化材料和催化反应。主要的任务有三个：1. 开发并改进现有的理论计算工具，发展出研究不同尺度问题的能力。2. 帮助理解实验中观察到的现象。3. 用计算设计并筛选出有潜力的催化材料，作为实验合成的候选材料。目前，新能源的生产和利用，化石燃料的清洁利用，以及环境污染物的治理依然是中国乃至人类社会亟待解决的问题。我以后的科研方向也会针对以上问题展开。

1. 人工光合作用系统

在光催化剂的帮助下直接利用太阳光分解水来制造氢燃料是摆脱化石燃料依赖的一个可行的方法。过渡金属氧化物是作为未来主要的一类光催化剂依然存在很多需要改进的问题，例如，带宽过宽、带边位置过低、不能有效传导光生载流子、表面反应速度慢等问题。理论计算可以帮助实验理解问题的原因、设计并合成更有效的光催化剂。主要的工作方向有三个：1. 计算材料的带宽、带边位置、电化学条件下的稳定性，筛选出具有合适性质的材料供实验合成表征。2. 从密度泛函理论到动力学蒙特卡洛，模拟光生载流子的动力学。其中不仅包括晶体内的电子空位扩散动力学，还包括一些局部效应对载流子的动力学的影响，比如，空位、杂质、表面、界面等。3. 计算氧化物/水界面上的催化反应过程，理解反应机理和助催化剂的作用，以帮助实验理解和设计表面的活性位点。

2. 质子交换膜燃料电池

PEMFC 可高效地利用氢气燃料来驱动汽车，是氢气能源利用的重要一环。目前的 Pt 纳米颗粒催化剂过于昂贵且会逐渐溶解于电解质。寻找一种廉价的替代催化剂是一项有革命性和挑战性的任务。在我以前的工作的基础上，我会将精力更多地投入在廉价的非金属催化剂上，例如含氮的过渡金属化合物 ($M-N_x/C$)、过渡金属硫族化合物、金属氧化物（包括钙钛矿）、金属氮化物、金属碳化物，等等。其中一个方向是利用 Noskov 建立起的理论体系，用计算筛选可能有效的催化剂。另一个方向是细致地研究表面的反应机理。在这一部分里面会把重点放在水环境的模拟和电极电势的模拟。以求对化学反应过程和质子电子传输过程有一个全面正

确的了解。

3. 甲烷的转化

天然气在地球的储量非常的丰沛。目前的利用方法主要是燃烧发电和蒸汽重整制造氢气。如果天然气能作为 C1 原料来直接制造烯烃、芳烃、醇，等等。那天然气的价值将会大大提高。甲烷转化的最大挑战来自于 C-H 的断开。目前 C-H 键的断开仍需要高温的帮助，这使得甲烷转化的经济效能大打折扣。我将利用计算寻找能将 C-H 键在低温下打开的催化剂。将研究的催化剂体系包括、金属合金、金属氧化物、金属/金属氧化物界面和沸石。甲烷转化催化剂的另一个重要要求是选择性，这必然涉及到多种中间产物和复杂的反应路径。我会利用加速的反应动力学方法计算出一个复杂的反应网络。这样可以不仅可以对反应机理有一个全面的了解。还可以结合微观动力学方法有效地预测反应生成物和它们各自的选择性。

4. 模拟光谱

第一性原理计算可以有效的计算出催化剂的性质和催化反应的路径。这些计算结果的正确性都依赖于原子模型的正确性。而原子模型的建立又很大程度上依赖实验上的表征结果。例如 XRD, PDF, XPS, UV-vis, EXAFS, XANES, EELS, Raman, 等等。但是这些光谱的解读经常地存在很大的模糊性。在学术成就的介绍中，我简单地介绍了我模拟 EXAFS 的工作。通过比较模拟出的 EXAFS（精确的原子模型）和实验测得的 EXAFS（精确的谱线），我们精确地表征了 Au_{147} 的结构。这表明在结构表征上，计算和实验的合作可以有效地消除光谱解读上的模糊空间。这将非常有助于研究者对材料的正确理解。在以后的工作中，我将在这个方向上继续发展，和实验者合作，更精确的表征材料的结构和状态。

总之，通过理论计算和模拟可以对催化材料的结构和性质有着原子和电子结构层面的了解。这对实验的理解有很大的帮助。随着计算机能力的提高和实验表征手段往原子级别发展，计算和实验表征的直接对比已经成为可能并会更加深入。不久以后，计算也将成为一种不可缺少的表征手段。