

姓 名	杨冰	性 别	男	出生年月	1985.02	
出生地	辽宁沈阳	婚姻状况	已婚	政治面貌	无	
国 籍	中国	从事专业	表面催化、物理化学、低维纳米材料			
现工作单位及职位		Research Associate, Argonne National Laboratory				
人事关系所在单位		Argonne National Laboratory				
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） 2000.09-2004.07 浙江大学竺可桢学院理科基地班 凝聚态物理专业 理学学士 2004.09-2010.07 北京中国科学院物理研究所 凝聚态物理专业 理学博士 2008.12-2010.02 德国马普学会Fritz-Haber研究所 化物系 联合培养博士生 （Max-Planck奖学金，物理化学专业） 2010.05-2012.12 德国马普学会Fritz-Haber研究所 化物系 博士后 2013.01-至今 美国阿贡国家实验室 材料科学学部 研究助理						

如内容较多，本栏目填不下时，可另纸接续（下同）。

主要学术成就、科技成果及创新点：

申请人长期从事基础催化和低维表面纳米结构的研究，在催化纳米功能材料的原子尺度加工、微观催化机理和反应动力学，以及动态反应条件下的原位表征等方面取得了一系列重要的原创性成果。迄今为止，共发表 SCI 论文 37 篇（一区论文 11 篇），总引用 600 余次，并以第一作者发表在 *J. Am. Chem. Soc.*（3 篇）、*Nano Letters* 等杂志上，其成果被 *Science*, *Nature Chemistry*, *Angewandte Chemie Int. Ed.*, *C&EN News* 等多家专业科学期刊和媒体进行专文报道。并受邀担任美国国家自然科学基金会 (NSF-GRFP) 和美国能源部研究发展委员会 (DOE-LDRD) 项目基金评审、以及长期担任多家国际知名学术期刊的评审工作。个人主要学术成果简要总结如下：

一、催化纳米功能材料的原子精度加工和能源催化

铜基催化剂的原子精度加工及其在二氧化碳加氢制甲醇反应中的应用：

在催化反应中，只有极少数具有特定尺寸、界面以及电子结构的纳米团簇才能形成高效催化活性单元，而传统的制备工艺难以获得原子精度的尺寸控制。申请人利用磁控溅射和质谱筛选联合系统，并发展相关技术，实现催化纳米团簇的原子精度加工和 atom-by-atom 修饰，目前该项技术在国际上处于领先地位。申请人在氧化铝载体上成功制备了 Cu_3 , Cu_4 , Cu_{20} 三种不同原子数目的金属原子团簇（单一尺寸分布），通过对活性组分的原子精度控制，定向调控 CO_2 加氢制甲醇的催化反应活性。相关实验结果表明铜基催化剂在动态反应条件下的化学价态和反应活性具有极强的尺寸依赖效应，其中 Cu_4 团簇常压反应制甲醇的转换频率高达 $4.0 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1} \cdot \text{atom}^{-1}$ ，明显优于文献报道的其他同类催化剂，是铜基催化剂催化制甲醇的高效活性结构。该研究成果在二氧化碳加氢制甲醇的微观反应机制研究，铜基催化剂活性组分结构优化，以及新型高效能纳米催化材料开发等领域开辟了全新的研究思路和途径。相关结果以共同第一作者发表在 *J. Am. Chem. Soc.* 137, 8676–8679 (2015), 并很快被 *Chemistry & Engineering News*, *ChemistryViews* 等多家媒体采访报道和转载，同时获得美国国家实验室官方新闻网站 *Argonne News Release* 专文报道，在相关领域取得广泛关注和影响。

二、Au 纳米催化的微观机理及其可控再生活化研究

1. Au 纳米催化活性判据和微观催化机理研究：

上个世纪 90 年代，日本科学家 M. Haruta 首次发现，化学属性不活泼的贵金属 Au 在纳米尺度上展现出超常的催化活性。该发现不仅历史性的改变了人们对贵金属 Au 的通常认知，也使得 Au 纳米催化在化学化工领域获得了空前的关注和广泛的研究。但是至今为止，对于 Au 纳米催化的本质在学术界仍然存在很多分歧，特别是由于缺乏原子/分子水平上的表征证据，使得在本质上揭示其微观催化反应过程和活化机制变得十分困难。结合高分辨表面分析技术和模型催化研究方法，申请人在原子尺度上揭示了氧化镁负载 Au 团簇的界面、电子结构，并利用二阶扫描隧道谱，实现了对表面吸附 CO 分子的空间定位和化学识别。申请人首次发现了带电 Au^- 二维纳米岛边缘电荷对 C=O 键的活化作用，并从扫描隧道谱和红外吸收谱两方面给出了确凿的实验证据。该成果首次在原子/分子水平上完整地揭示了 Au 纳米催化的本质以及边缘富余电荷对 CO 分子的活化机制。相关工作分别以第一作者和第二作者发表于 *J. Phys. Chem. C* 114, 8997–9001 (2010); *J. Am. Chem. Soc.* 132, 7745–7749 (2010)，作为判定 Au 纳米催化活性的重要依据，得到了专业领域内的广

泛认同和引用。

2. Au纳米催化剂的尺寸重整和再生活化:

催化剂颗粒在长期高温反应后由于烧结作用会导致失活。如何可逆或部分可逆地实现金属团簇的尺寸重整和再生活化, 长期以来都是催化剂回收利用和成本控制的重要课题。申请人创新性地采用了含硫化合物TPB有机分子, 用以捕获在Au纳米团簇之间扩散的表面原子, 成功实现了对Ostwald Ripening过程的反转, 并利用扫描隧道显微镜研究了TPB-Au的复合结构和捕获过程, 最终实现了Au纳米团簇的尺寸重整和二次分散。该成果对催化活性组分的再生活化和回收利用具有重要的理论和实际指导价值。相关成果以第一作者发表在*J. Am. Chem. Soc.* 134, 11161 (2012), 入选该期Editor推荐文章JACS spotlight, 并被推荐为该期封面文章cover story。由于其在领域内的重要影响, 该成果很快被Nature Chemistry杂志research highlights特别报道 (*Nature Chemistry* 4, 431, 2012), 被高度评价为是有效反转催化剂烧结过程的全新方法: “The ability of TPB to trap gold atoms on both a gold and an oxide surface demonstrates its potential as a redispersion agent.”

三、二维氧化物材料的原子尺度表征和载体界面调控

1. 史上最“薄”的二维纳米玻璃:

低维层状氧化物在微纳光电器件、工业催化、新兴能源等前沿领域具有广泛的应用前景。特别是随着工艺技术的进步和小型化的需求, 使得在原子尺度上氧化物界面的结构表征和定向调控, 成为新的研究热点。但是长期以来, 由于受限于氧化物自身结构的复杂性以及广泛的不导电性, 使得人们对其界面结构的微观认知非常匮乏。利用分子束外延, 申请人第一次成功地在金属单晶表面制备出世界上最薄的双原子层纳米玻璃(厚度仅为 0.3nm), 实验证据表明其与体相玻璃具有完全相同的结构属性。Zachariasen早在 1932 年就提出了玻璃态的random network 理论模型, 尽管 80 年来该理论模型被学术界广泛接受和采用, 但是由于实验技术限制, 一直未能获得直接实验证据支持。利用扫描探针显微镜, 申请人首次在实空间获得了非晶态二氧化硅的原子结构排布和无序网络结构, 在Zachariasen提出玻璃态random network 理论模型 80 年后, 首次对非晶态玻璃random network theory给出了决定性的实验证据。相关工作以第一作者和共同作者发表在*Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 11344 (2012); *Angew. Chem. Int. Ed.* 51, 404 (2012); *Phys. Rev. Lett.* 105, 146104 (2010)。一系列成果发表后立即在相关领域内引起了广泛关注, 并被《科学》杂志 (*SCIENCE* 342 201 (2013)), *Angewandte Chemie Int. Ed (Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, 52, 52–60), *Research in Germany*, *R&D News*等多家专业科学杂志和媒体报道。

美国国家科学院院士 Michael F. Thorpe 教授在其撰写的综述 (*Phys. Status Solidi B* 250, 931 – 936 (2013))中评论道: “After 80 years, experiments and theory do not yet agree as well as one would like ... When this happens, Zachariasen’s famous sketch of a glassy network will finally be fully demonstrated with a full two-dimensional atomic network topology, including medium range order, visible to all.”该成果被评价为玻璃态 random network 研究中里程碑式的工作。

2014 年该系列成果被德国马普学会 (Max-Planck Society) 评选为 2014 年度重大可进进展并入选年度科技新闻 (Yearbook2014), 同时Max-Planck学会官方网站以刊物专文的形式 (Research highlights) 着重报道该工作; 其中 2014 年度马普学会下属的 88 家科研院所中仅有 130 篇成果入选年度科技新闻, 其中仅有 3 篇工作被Max-Planck学会官方网站特别报道。

2. 类石墨烯二维 Silicatene 拓扑缺陷的纳米调控:

随着二维纳米材料的兴起, 表面拓扑缺陷的研究, 特别是通过表面缺陷结构的精细加工 (Defect Engineering) 定向调控其电子学、化学属性逐渐成为当前二维材料研究中的热点发展方向。类石墨烯二维氧化硅烯 (Silicatene) 由于其特异

的绝缘性能，作为新型纳米介电材料被广泛关注。但是由于材料本身和研究手段的限制，对缺陷结构的表征和调控一直都受到局限。申请人利用扫描探针显微镜在原子尺度上揭示了单层Silicatene表面拓扑缺陷结构，不仅观测到了常规的 5-7 杂环缺陷，并且第一次在实验中发现到了理论上预言的Haeckelite 5-6-7 三重对称性拓扑缺陷。进一步利用缺陷加工工艺，申请人首次成功地制备出大面积有序Haeckelite周期性缺陷阵列，作为加工电子点阵列以及合成单分散催化纳米颗粒的新型模板材料具有十分重要的应用前景。相关结果以第一作者发表于*Nano Letters* 13, 4422 (2013)，对于调控二维silicatene表面缺陷、制备有序低维纳米结构具有重要的研究价值。

美国普渡大学的 Yong P. Chen 教授在其撰写的综述文章（*Nature Nanotechnology* 9, 755, 2014）中这样评论道：“investigations of bilayer silica reveal the presence of topological and point defects similar to those observed in graphene...This peculiarity is ultimately reflected in the strong tendency of 2D silica to form a vitreous (amorphous) phase, which realizes the limit of high concentration of topological defects.”该成果对于理解石墨烯等二维材料的表面缺陷结构和性质具有重大指导意义。

3. 二维分子筛（2D zeolite）和表面羟基改性：

以硅酸盐和沸石为基础的分子筛催化剂以其多重孔道结构和特异的催化性能，成为新型催化材料的研究热点。但是长期以来对于分子筛催化剂的微观结构性能，特别是可控表面羟基改性一直都是表面化学和催化领域具有重大挑战的研究课题。申请人通过对二维氧化硅材料的子级超精细参杂（Al, Fe, Ti, C等），首次成功地制备了多种二维层状分子筛材料，并以 CO作为探针分子精确校正了表面参杂位的Lewis酸性，成功实现了二维分子筛材料的表面化学改性。同时，利用表面缺陷加工工艺，申请人首次实现了表面羟基物理位置的可控改性，在二氧化硅表面成功制备出二维有序的羟基阵列，并揭示了表面羟基与杂环缺陷的直接关系。相关工作分别以第一作者和共同作者发表于*J. Phys. Chem. Lett.* 5, 1701 (2014)；*J. Phys. Chem. C* 117, 8336 (2013)；*Surf. Sci.* 632, 9 (2015) [封面文章]；*Angew. Chem. Int. Ed.* 51, 6005 (2012)；*J. Am. Chem. Soc.* 135, 19222 (2013)等。一系列原创性成果在表面羟基的物理化学改性、模拟和理解沸石分子筛内表面的物理化学过程，以及开发新型二维分子筛催化材料等相关领域做出了突破性贡献。

四、单分子手性识别和不对称催化

有机分子的手性识别和不对称催化在药物合成、选择性制备等多个领域具有重要的科研价值。但是长期以来对于手性选择，特别是单分子水平上手性识别微观机制的认知还不够完备。利用扫描探针技术，申请人在金属单晶表面成功实现了喹吖啶酮染料分子衍生物（Quinacridone derivatives）的单分子手性识别，并研究了分子间自组装手性结构的相互作用机制。特别是通过特征官能团设计，实现对分子手性结构的调控，首次提出并发现了“手性取代”的微观机制，进一步揭示了取代基基团在分子手性选择和手性识别中的重要作用。相关成果分别以第一作者和共同作者发表于*J. Am. Chem. Soc.* 132, 10440-10444 (2010)；*Nano.Lett.* 12 (3), 1229-1234 (2012)，为通过分子官能团设计，系统性的调控分子手性结构开辟了新的途径。

五、基于同步辐射光源的动态反应原位表征

依托同步辐射光源，申请人参与并发展了一套原位表征测试平台（SAXS/XAS/TPR 联合系统），可以在工业反应条件（高温高压）下，同时针对催化剂材料的微观物理尺寸、化学价态以及反应活性进行动态实时监测。该技术具有测量样品多样，压力温度范围广等特点，为催化剂在工业反应条件下的动态结

构解析提供了全方位的表征手段，在领域内取得了重大突破和领先地位。自 2013 年起，申请人参与并主要负责壳牌石油公司（Shell International Exploration and Production Inc.）的横向研发项目（总项目金额：270.2 万美元）。利用与 Argonne 先进光源实验室联合研发的原位测试平台，申请人成功实现了工业催化剂在氧化偶联甲烷活化反应中的原位表征和动态反应性能优化，在工业催化剂的动态结构解析、理解微观反应机制，以及开发新型高效能催化剂等领域取得了突破性进展。（相关成果隶属保密协议）

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。

30. X. Yu, E. Emmez, Q. Pan, **B. Yang**, S. Pomp, W. E. Kaden, M. Sterrer, S. Shaikhutdinov, H-J Freund, I. Goikoetxea, R. Włodarczyk, J. Sauer. Electron stimulated hydroxylation of a metal supported silicate film. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18, 3755 (2016); 总引用次数: 2, 他引次数: 1; 期刊影响因子: 4.493

29. C. Liu[#], **B. Yang**[#], E. Tyo, S. Seifert, J. DeBartolo, B. von Issendorff, P. Zapol, S. Vajda, L. Curtiss. Carbon Dioxide Conversion to Methanol over Size-selected Cu₄ clusters at Low Pressures. *J. Am. Chem. Soc.* 137, 8676–8679 (2015) (# 共同第一作者); 总引用次数: 10, 他引次数: 9; 期刊影响因子: 12.113

28 B. Yang, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. Ultrathin silicatene /silicon-carbide hybrid film on a metal substrate. *Surf. Sci.* 632, 9-13 (2015) **【Featured Article and Cover Story】**; 总引用次数: 5, 他引次数: 4; 期刊影响因子: 1.925

27. **B. Yang**, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. Tuning Spatial Distribution of Surface Hydroxyls on a Metal-supported Single-layer Silica. *J. Phys. Chem. Lett.* 5, 1701-1704 (2014); 总引用次数: 5, 他引次数: 2; 期刊影响因子 7.458

26. E. Emmez[#], **B. Yang**[#], S. Shaikhutdinov, H-J Freund. On the Permeation of a Single-Layer SiO₂ Membrane and Chemistry in Confined space. *J. Phys. Chem. C* 118, 29034–29042 (2014) (#共同第一作者); 总引用次数: 12, 他引次数: 6; 期刊影响因子: 4.772

25. J.J. Uhlrich, **B. Yang**, S. Shaikhutdinov. Methanol Reactivity on Silica-Supported Ceria Nanoparticles. *Top. Catal.* 57, 1229-1235 (2014); 总引用次数: 5, 他引次数: 5; 期刊影响因子: 2.365

24. C. Büchner, L. Lichtenstein, X. Yu, J. A. Boscoboinik, **B. Yang**, M. Heyde, S. Shaikhutdinov, R. Włodarczyk, M. Sierka, J. Sauer, and H-J Freund. Ultrathin Silica Films: The Atomic Structure of Two-dimensional Crystals and Glasses. *Chem. Eur. J.* 20, 9176 (2014); 总引用次数: 11, 他引次数: 6; 期刊影响因子: 5.731

23. R. Włodarczyk, J. Sauer, X. Yu, J. A. Boscoboinik, **B. Yang**, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. The atomic structure of an ultrathin Fe-silicate film grown on a metal: A monolayer of clay? *J. Am. Chem. Soc.* 135, 19222 (2013); 总引用次数: 8, 他引次数: 3; 期刊影响因子: 12.113

22. **B. Yang**, J. A. Boscoboinik, X. Yu, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. Patterned defect structures predicted for graphene are observed on single-layer silica films. *Nano Letters* 13, 4422–4427 (2013); 总引用次数: 22, 他引次数: 16; 期刊影响因子: 13.592

21. **B. Yang**, E. Emmez, W. Kaden, X. Yu, J. A. Boscoboinik, M. Sterrer, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. Hydroxylation of Metal-Supported Sheet-Like Silica Films. *J. Phys. Chem. C* 117, 8336–8344 (2013); 总引用次数: 11, 他引次数: 5; 期刊影响因子: 4.772
20. J. A. Boscoboinik, E. Emmez, X. Yu, **B. Yang**, S. Shaikhutdinov, F.D. Fischer, J. Sauer, H-J Freund. Interaction of Probe Molecules with Bridging Hydroxyls of Two-Dimensional Zeolites: A Surface Science Approach. *J. Phys. Chem. C* 117, 13547-13556 (2013); 总引用次数: 27, 他引次数: 19; 期刊影响因子: 4.772
19. J. A. Boscoboinik, X. Yu, **B. Yang**, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. Building blocks of zeolites on an aluminosilicate ultra-thin film. *Microporous and Mesoporous Materials* 165, 158 (2013); 总引用次数: 16, 他引次数: 9; 期刊影响因子: 3.453
18. **B. Yang**, W. E. Kaden, X. Yu, J. A. Boscoboinik, Y. Martynova, L. Lichtenstein, M. Heyde, M. Sterrer, R. Włodarczyk, M. Sierka, J. Sauer, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. Thin silica films on Ru(0001): Monolayer, bilayer and three-dimensional networks of [SiO₄] tetrahedra. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 11344 (2012); 总引用次数: 40, 他引次数: 20; 期刊影响因子: 4.493
23. **B. Yang**, Y. Pan, X. Lin, N. Nilius, H-J Freund, C. Hulot, A. Giraud, S. Blechert, S. Tosoni, J. Sauer. Stabilizing Gold Adatoms by Thiophenyl Derivatives: A Possible Route toward Metal Redispersion. *J. Am. Chem. Soc.* 134,11161(2012) **【JACS spotlight and Cover Story】**; 总引用次数: 5, 他引次数: 3; 期刊影响因子: 12.113
17. Y. Pan, **B. Yang**, C. Hulot, S. Blechert, N. Nilius, H-J Freund. Role of lattice-gas atoms on the adsorption behaviour of thioethermolecules. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 10987 (2012); 总引用次数: 7, 他引次数: 6; 期刊影响因子: 4.493
16. J. A. Boscoboinik, X. Yu, **B. Yang**, F. D. Fischer, R. Włodarczyk, M. Sierka, S. Shaikhutdinov, J. Sauer, H-J Freund. Modeling Zeolites with Metal-Supported Two-Dimensional Aluminosilicate Films. *Angew. Chem. Int. Ed.* 51, 6005 (2012); 总引用次数: 39, 他引次数: 25; 期刊影响因子: 11.261
15. J. A. Boscoboinik, X. Yu, **B. Yang**, F. D. Fischer, R. Włodarczyk, M. Sierka, S. Shaikhutdinov, J. Sauer, H-J Freund. Modellierung von Zeolithen durch zweidimensionale Aluminosilicatfilme auf Metallunterlagen. *Angew. Chem.* 124, 6107 (2012); 总引用次数: 6, 他引次数: 2; 期刊影响因子: 11.261
14. X. Yu, **B. Yang**, J. A. Boscoboinik, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. Support Effects on the Atomic Structure of Ultrathin Silica Films on Metals. *Appl. Phys. Lett.* 100, 151608 (2012); 总引用次数: 37, 他引次数: 22; 期刊影响因子: 3.302
13. Y. Martynova, **B. Yang**, X. Yu, J. A. Boscoboinik, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. Low Temperature CO Oxidation on Ruthenium Oxide Thin Films at Near-atmospheric Pressures. *Catal. Lett.* 142, 657-663 (2012); 总引用次数: 19, 他引次数: 11; 期刊影响因子: 2.307

12. L. Lichtenstein, C. Büchner, **B. Yang**, S. Shaikhutdinov, M. Heyde, M. Sierka, R. Włodarczyk, J. Sauer, H-J Freund. The Atomic Structure of a Metal Supported Vitreous Thin Silica Film. *Angew. Chem. Int. Ed.* 51, 404-407 (2012); 总引用次数: 90, 他引次数: 65; 期刊影响因子: 11.261
11. L. Lichtenstein, C. Büchner, **B. Yang**, S. Shaikhutdinov, M. Heyde, M. Sierka, R. Włodarczyk, J. Sauer, H-J Freund. Die atomare Struktur eines metallgestützten glasartigen dünnen Silikafilms. *Angew. Chem.* 124, 416-420 (2012); 总引用次数: 10, 他引次数: 6; 期刊影响因子: 11.261
10. R. Włodarczyk, M. Sierka, J. Sauer, D. Löffler, J. Uhlrich, X. Yu, **B. Yang**, I. Groot, S. Shaikhutdinov, H-J Freund. Tuning the electronic structure of ultrathin crystalline silica films on Ru(0001). *Phys. Rev. B* 85, 085403 (2012); 总引用次数: 37, 他引次数: 19; 期刊影响因子: 3.736
9. H. Y. Cun, Y. L. Wang, S. X. Du, L. Zhang, L. Z. Zhang, **B. Yang**, X. B. He, Y. Wang, X. Y. Zhu, Q. Z. Yuan, Y-P Zhao, M. Ouyang, W. A. Hofer, S. J. Pennycook, H-J Gao. Tuning Structural and Mechanical Properties of Two-Dimensional Molecular Crystals: The Roles of Carbon Side Chains. *Nano.Lett.* 12 (3), 1229–1234 (2012); 总引用次数: 13, 他引次数: 11; 期刊影响因子: 13.592
8. **B. Yang**, X. Lin, N. Nilius, H-J Freund. Role of the V₂O₃(0001) Defect Structure in the Adsorption of Au Adatoms. *J. Phys. Chem. C* 115, 3404–3409 (2011); 总引用次数: 2, 他引次数: 2; 期刊影响因子: 4.772
7. **B. Yang**, Y. L. Wang, H. Y. Cun, X. B. He, M. C. Xu, Y. Wang, K-H Ernst and H-J Gao. Direct observation of Chirality Substitution in Molecular Monolayer. *J. Am. Chem. Soc.* 132, 10440-10444 (2010); 总引用次数: 16, 他引次数: 10; 期刊影响因子: 12.113
6. **B. Yang**, X. Lin, H-J Gao, N. Nilius, H-J Freund. CO Adsorption on Thin MgO Films and Single Au Adatoms: A Scanning Tunneling Microscopy Study. *J. Phys. Chem. C* 114, 8997–9001 (2010); 总引用次数: 9, 他引次数: 7; 期刊影响因子: 4.772
5. X. Lin, **B. Yang**, H-M Benia, P. Myrach, M. Yulikov, A. Aumer, M. A. Brown, M. Sterrer, O. Bondarchuk, E. Kieseritzky, J. Rocker, T. Risse, H-J Gao, N. Nilius, H-J Freund. Charge-Mediated Adsorption Behavior of CO on MgO-Supported Au Clusters. *J. Am. Chem. Soc.* 132, 7745-7749 (2010); 总引用次数: 60, 他引次数: 51; 期刊影响因子: 12.113
4. D. Löffler, J. Uhlrich, M. Baron, **B. Yang**, X. Yu, L. Lichtenstein, L. Heinke, C. Büchner, M. Heyde, S. Shaikhutdinov, H-J Freund, R. Włodarczyk, M. Sierka, J. Sauer. Growth and Structure of Crystalline Silica Sheet on Ru(0001). *Phys. Rev. Lett.* 105, 146104 (2010); 总引用次数: 80, 他引次数: 55; 期刊影响因子: 7.512
3. H. Y. Cun, Y. L. Wang, **B. Yang**, L. Zhang, S. X. Du, Y. Wang, K-H Ernst, H-J Gao. Homochiral Recognition Among Organic Molecules on Cu(110). *Langmuir* 26, 3402-3406

(2010) ; 总引用次数: 14, 他引次数: 9; 期刊影响因子: 4.457

2. **B. Yang**, Y. L. Wang, G. Li, H. Y. Cun, Y. Ma, S. X. Du, M. C. Xu, Y. L. Song, H-J Gao. Influence of Deoxyribose Group on Self-Assembly of Thymidine on Au(111). J. Phys. Chem. C113, 17590-17594 (2009); 总引用次数: 9, 他引次数: 9; 期刊影响因子: 4.772

1. D. X. Shi, W. Ji, **B. Yang**, H. Y. Cun, S. X. Du, L. F. Chi, H. Fuchs, W. A. Hofer, H-J Gao. Alternating Crystalline Structural Transition of Coronene Molecular Thin Films on Ag(110) by Temperature Increasing. J. Phys. Chem. C 113, 17643-17647 (2009); 总引用次数: 4, 他引次数: 2; 期刊影响因子: 4.772

所列论文总数 30 (自 2009 年), 总引用 638 次, 他引 520 次, 引用数据和期刊影响因子依据 google scholar 和 web of science 数据库统计, 查询截止日期 2016 年 5 月 30 日。

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)

1. 壳牌石油国际公司研发项目: 甲烷氧化偶联反应的基础催化研究 (270.2 万美元), 负责实验系统的搭建以及研究任务的分配、执行和管理。
2. 美国能源部基础能源科学 (DOE-BES): 纳米结构碳材料 (277.5 万美元), 参与项目并领导主要实验
3. 美国能源部, 实验室指导研发项目 (DOE-LDRD): 超精细纳米团簇: 能源催化材料的新机遇 (60 万美元), 项目主要研究员,
4. 德国自然科学基金 (DFG): 基础催化-创新与整合 (3.3 万欧元), 项目主要研究人员

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：

1. 2010-2013 年获得德国马普协会博士后奖学金（Max-Planck Postdoctoral Fellowship）
2. 2008-2010 年获得德国马普协会博士生奖学金（Max-Planck Ph.D. Fellowship）
3. 2008 年中国科学院物理研究所所长表彰奖
4. 2002 年全国大学生数学建模竞赛浙江省一等奖
5. 2000-2003 年连续获得浙江大学“竺可桢班”奖学金
6. 2000 年获得浙江大学“新生入学奖学金”

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）：

催化纳米功能材料的原子精度加工和动态反应优化

随着纳米技术的不断发展，材料加工精度也在日益提高，而原子作为物质组成的最小单元，使得单原子加工将成为未来纳米技术的终极挑战。可以想见在不远的将来，以单个原子作为基础单元重新构建、组装、加工新型纳米材料，从而定向调控其物理化学性能，势必成为下一代技术革命的核心内容。特别是在催化领域，多相催化在环境、化工和能源等新兴支柱产业中都有着广泛的应用，而在微观尺度上对催化过程有贡献的高效催化活性结构通常仅由极少数具有特定物理尺寸、化学环境的活性组分组成。而复杂的反应环境，使得精确定位和解析这些高效活性结构变得十分困难。更由于传统催化工艺的限制，难以在原子精度上实现催化活性组分的加工和调控，使得现有工业催化剂的催化效率无法在本质是取得突破。因此，亟需发展相关工艺技术，实现催化活性组分的原子精度加工、动态原位表征和构效关系调控，为新型催化纳米功能材料的定向设计和高效工业催化剂的结构优化提供全新的研究途径和维度。

基于上述理念，申请人计划发展催化纳米功能材料的原子精度加工工艺，对催化活性组分进行原子尺度加工和调控，最终实现以单个原子为基础单元 atom-by-atom 组建催化纳米结构，并结合石墨烯、硫化钼、二维氧化物等新兴二维材料作为催化载体，利用其新颖的能带结构和界面性质，定向调控催化性能。在材料表征方面，申请人计划联合原位扫描探针显微镜、原位透射电镜和基于同步辐射光源的原位表征技术，实现在动态反应条件下催化剂活性组分的原子结构解析，并在在单原子/分子水平上探索催化反应机制和动力学过程。致力于发展一整套集制备、调控、表征、测试于一体，催化纳米功能材料原子精度加工设计的全新研究方法，并探索新型催化材料在二氧化碳活化、贵金属替代、能源催化等相关领域的应用。最终实现高效能催化纳米功能材料的制备、加工和设计，并拓展其在多相催化，电化学催化，光催化等多领域的应用，期望利用现有的研究基础和系统性的制备表征方法，带动相关学科和研究领域向原子尺度深入。

研究思路：

(1) 动态结构解析：利用动态反应原位表征技术，对传统催化剂，特别是实用工业催化剂的活性组分进行动态解析，精确定位催化剂的有效成分和结构。

(2) 基础催化模型：基于对工业催化剂有效组分结构的分析结果，以原子精度重新对其微观活性结构进行逐一筛选，寻找高效催化活性结构；并结合多种原位表征技术，研究动态反应条件下的微观反应机理和反应路径。

(3) 原子尺度设计：依托基础催化模型的研究结果，结合新兴二维材料作为催化载体，实现活性组分的定向优化设计，开发高效能催化纳米功能材料。

(4) 动态反应优化：在高温高压反应条件下建立动态构效关系，并进一步优化反应活性，实现与工业反应条件的对接。

依托传统工业催化反应，立足于基础催化研究，发展原子精度加工和动态反应表征技术，探索新型高效能催化纳米功能材料的定向设计，实现基础催化与工业应用的衔接与过渡

研究内容：

1) 催化纳米功能材料的原子精度加工和能源催化：近年来，随着页岩气革命和从海水中提取二氧化碳等技术成功，使得 CH_4 和 CO_2 逐渐成为能源催化领域的

研究热点，有希望替代石油成为下一代新型能源产业的基础资源。围绕甲烷活化和二氧化碳加氢等能源催化反应，高效能催化功能材料的定向设计优化，已经成为其工业化途径中亟需解决的重大问题。在原子精度上重新定位、筛选并选择性制备高效活性组分，是进一步提高现有催化效率的有效手段，也是解决目前能源问题的有效途径。基于上述理念，申请人计划发展催化纳米功能材料的原子精度加工技术，实现催化活性组分的高精度选择性加工和制备，并结合原位扫描显微镜、原位透射电镜技术和基于同步辐射光源的原位表征技术，在动态反应条件下表征催化反应机制、优化催化活性，在传统工业催化剂的基础上探索新型高效能催化纳米功能材料在CO₂转化、甲烷活化等能源催化相关领域的应用。具体研究内容包括：铜基催化剂CO₂加氢反应研究，铁（钴）基费托反应研究，镍基甲烷二氧化碳重整反应研究等。

2) 双金属纳米合金和贵金属替代：双金属团簇和多组分纳米合金，由于其微观界面所形成的混合互补结构，使其展现出全新的物理化学特性，近年来逐渐成为新的研究热点。特别是过渡金属的碳化物（碳化钨，碳化钼等），其电子结构和物性与Pt，Ru非常接近，且相对廉价，使其成为贵金属替代品的首选材料，具有很高的工业应用价值。申请人计划首先利用金属单晶表面作为模型催化剂，研究不同合金相的原子结构和配位。结合原位扫描隧道显微镜、原位透射电镜和原位红外吸收谱，在实际催化反应条件下表征催化表面结构变化，揭示分子吸附、反应的微观过程。基于模型催化剂的研究结果，申请人将进一步利用纳米团簇原子精度加工技术，制备多组分纳米合金和金属碳化物团簇，并在动态反应条件下模拟真实催化反应过程，通过精确控制合金团簇的组分配比，调控其催化界面结构（包括核壳结构等），研究其在催化过程中的微观协同机制和助催化效应，探索新型多组分合金催化剂和贵金属替代材料，并拓展在费托反应、电化学催化等相关反应中的研究应用。具体研究内容包括：钴合金（铂钴、铜钴合金等）催化费托反应研究，碳合金（碳化钨，碳化钼等）和贵金属替代，铂合金（铂镍、铂铜合金等）阴极氧还原反应(ORR)研究等。

3) 二维纳米材料的原子表征和物性调控。近年来，随着对石墨烯、硫化钼、二维氧化物等新兴二维材料研究日益扩展，二维纳米体系所展现出的新颖能带结构和界面性质逐渐成为学术界和工业界共同关注的热点。虽然已有部分研究开始关注二维材料在光电催化领域的应用，但是目前仍然处于材料探索阶段，而对于二维材料电子转移和能带结构的精细调控以及催化反应微观机制的研究尚未取得重大进展。申请人计划利用探针扫描技术和表面分析手段，以Graphene Oxide、MoS₂等二维催化材料等为研究对象，在原子水平上研究边缘界面结构、微观缺陷构型对电子能带结构的调控作用，并在动态反应条件下揭示其微观电子结构特性与反应活性的对应关系，力求在原子尺度上揭示二维材料在实际反应条件下的电子转移、分子吸附活化等微观催化反应过程和机制，希望通过对二维材料界面缺陷结构的调控和微观反应机制的理解，实现基于二维材料的新型催化纳米功能材料的开发和设计，并拓展其在光电、能源催化领域的应用。

4) 工业催化剂的动态反应原位表征：动态反应原位表征技术对于工业催化剂在实际反应进程中动态结构解析提供了全新的研究途径。申请人在美国 Argonne 国家实验室积累了丰富的原位表征经验，特别是基于同步辐射光源的原位表征技术，包括原位 X-ray Absorption Spectroscopy (in-situ XANES/EXAFS), Small Angle X-ray Scattering/Diffraction (in-situ SAXS/XRD)以及在线质谱活性测量联合系统，

可以在工业反应条件对催化剂物理形貌、化学价态和反应活性进行实时监测，建立动态构效关系，实现工业催化剂的动态结构解析。回国后，计划进一步发展此项原位表征技术，并依托国内同步辐射光源线站，开展工业催化剂的原位表征、微观结构解析等研究。并希望通过发展和联合其它原位表征手段，如原位扫描隧道显微镜、原位透射电镜、原位红外和紫外可见光谱技术（in-situ IR/UV-Vis）等相关技术，在动态反应条件下（高温高压）实现对催化剂的界面吸附分子构型、反应中间物、表面原子形貌与催化性能的动态识别和关联，并搭建基于实验室的动态反应表征系统。