

# 中国科学院大连化学物理研究所

## 优秀博士后支持计划申请书

申 请 人: 江训柱

研 究 组: 1502 组

学科专业: 工业催化

合作导师: 张涛

填表日期: 2025 年 11 月 27 日

中国科学院大连化学物理研究所制

姓 名	江训柱		性 别	男			
出生日期			民 族	汉			
学历/学位	博士研究生		授予博士学位时间	2025. 06. 29			
博士毕业院校	中国科学院大连 化学 物理研究所		(拟) 进站时间	2025. 07. 31			
E-Mail			联系电话				
研究领域	单原子催化剂设计及性能调控						
学习 经历 从本科起	起止年月	所在单位/专业			所获学位		
	2014. 09-2018. 06	大连理工大学/应用化学 (张大煜化学菁英班)			理学学士		
	2018. 09-2025. 06	中国科学院大连化学物理研究所			工学博士		
工作 经历	起止年月	所在单位			职务		
	2025. 07-至今	中国科学院大连化学物理研究所			博士后		
进站 前期 及入 站后 科研 情况 简介	1、主持或参与项目情况:						
	序号	项目名称	项目来源	项目 金额	起止年度	角色	进站前/ 入站后
2、代表性论文(10 篇以内)							
注: 第一作者或共同一作第一, “作者排序” 中, 如为通讯作者请填写“C”。							
序号	论文题目	期刊名	影响 因子	发表年度/卷 期/页码	排序	进站前/ 入站后	
1	"Suspended" Single Rhenium Atoms on Nickel Oxide for Efficient Electrochemical Oxidation of Glucose	Journal of the American Chemical Society	15.7	2025/147(6) /4886-4895	共 同 一 作 第一	进站前	
2	Density effect of Re <sub>1</sub> electronic promoter on the activity of Pt <sub>1</sub> -catalyzed hydrosilylation	Molecular Catalysis	4.9	2025/573/1 14853	第 一 作者	进站前	
3	Single-Atom Catalysts Based on the Metal-Oxide Interaction	Chemical Review	55.8	2020/120/1 1986-12043	共 同 一 作 第四	进站前	

	4	Ultra-sensitive hydrogen sensing by Au <sub>1</sub> /In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> single-atom catalysts	Sensors and Actuators: B. Chemical	7.7	2026/450/139208	C	入站后
	其他论文发表情况						
	1	Strong Metal-Support Interaction Facilitated Multicomponent Alloy Formation on Metal Oxide Support	Journal of the American Chemical Society	15.7	2023/145/22671-22684	4	入站前
	2	Achieving "True" Selective Hydrogenation by CO Treatment of the Pt/TiO <sub>2</sub> Catalyst	Journal of the American Chemical Society	15.7	2025/147/26319-26328	5	入站前
	3	Switchable Tuning CO <sub>2</sub> Hydrogenation Selectivity by Encapsulation of the Rh Nanoparticles While Exposing Single Atoms	Small	12.1	2022/18/2204490	3	入站前
	4	Catalytic propane dehydrogenation by anatase supported Ni single-atom catalysts	Chinese Journal of Catalysis	17.7	2024/57/105-113	2	入站前
	5	Top - down fabrication of active interface between TiO <sub>2</sub> and Pt nanoclusters. Part 1: Redispersion process and mechanism	Chinese Journal of Catalysis	17.7	2024/58/237-246	4	入站前
	6	Highly Active and Sintering-Resistant Pt Clusters Supported on FeO <sub>x</sub> -Hydroxyapatite Achieved by Tailoring Strong Metal-Support Interactions	ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES	8.2	2024/16/22007-22015	4	入站前
	7	Sintering-and water-resistant perovskite quantum dots supported by inorganic materials for enhanced luminescence	Journal of Energy Chemistry	14.9	2025/18/508-516	5	入站前
	8	Direct synthesis of a disinfectant with fresh scent of green plants by semi-hydrogenation of alkynol on Pd single-atom catalysts	NANO RESEARCH	9	2024/17/3872-38787	4	入站前
	9	Operando induced strong metal-support interaction of Rh/CeO <sub>2</sub> catalyst in dry reforming of methane	Applied Catalysis B: Environmental	21.1	2024/343/123503	4	入站前
	3、专利情况:						

入站前期及入站后科研情况简介	序号	专利名称	授权/申请	授权/申请号	起始日期	排序	入站前/入站后
	1	一种高负载率的铈单原子催化剂及其制备方法和在醛氘代反应中的应用	申请	202211586532.9	2022-12-09	2	入站前
	2	一种配体辅助稳定的单原子铈基催化剂及其制备方法和应用	申请	202211583852.9	2022-12-09	2	入站前
	3	Synthesis method for preparing dideuterated primary alcohols through catalyzing the hydrogenation and hydrogen-deuterium exchange reaction of aldehydes	授权	NL2038879B1	2025-08-15	3	入站前
	4、获奖情况：						
	序号	奖励名称	奖励等级	授奖单位	奖励年度	排序	入站前/入站后
	1	中国科学院大学三好学生	校级	中国科学院大学	2021		入站前
	2	延长石油企业奖学金	校级	中国科学院大连化学物理研究所	2025		入站前
博士后工作研究计划	<b>博士后研究题目：纳米颗粒氧化再分散行为描述符研究</b> <b>（简述研究计划的可行性、先进性和创新性，理论和现实意义）</b> <b>1、研究意义</b> 单原子催化剂凭借其独特的电子结构、量子尺寸效应及最大化的原子利用率，在多相催化、能源转化、环境治理和生物医学等领域展现出广阔的应用前景。然而，当金属物种分散度达到单原子尺寸时，表面能会急剧增大。因此，在实际应用过程中，传统负载型金属催化剂中常见的烧结问题在单原子催化剂中更加严重，高表面能的单原子物种在高温、高压等复杂反应环境下极易发生烧结，导致金属物种分散度大幅下降，活性位点数目大幅减少，最终使反应产物的选择性和收率也显著降低。因此，在全寿命周期内维持单原子催化剂高分散度，抑制催化剂烧结团聚失活对于单原子催化剂的实际应用至关重要。 针对该问题，一方面，研究人员通过载体工程、配位工程等策略优化单原子位点的本征稳定性，进而抑制其在反应条件下的烧结过程。另一方面，针对已经发生烧结的单原子催化剂，通过后续焙烧再分散等处理过程使其分散度提高、催化活性						

能恢复。后者不依赖特定的反应体系，无需针对催化剂微观结构进行复杂的设计、调控及合成，而仅需针对催化剂再分散行为本身进行研究，具有良好的普适。因此，发展烧结单原子催化剂的再生方法对于延长单原子催化剂使用寿命、降低金属催化剂使用成本至关重要。

理解单原子催化剂的团聚和稳定机制是发展再分散催化剂体系的核心。单原子催化剂团聚一般以熟化机理为主，即金属单原子在一定的高温或气氛条件下，在载体表面扩散（或气相迁移）至较大尺寸的金属团簇或颗粒上，使其粒径长大。因此，从理论上讲，发展逆熟化策略（即再分散过程）不仅可以实现烧结单原子催化剂的再生，同时也能从深层次理解单原子催化剂中气氛-金属-载体三者的相互作用机制，指导热稳定单原子催化剂的设计开发。尽管研究人员已经发展了多种再分散体系，在工业过程中也已有实际应用。然而，目前对能发生再分散的体系范围仍缺乏系统性调查，相应地，对于再分散的具体机制和内在规律也缺乏统一的理论解释，这极大地阻碍了对再分散现象的深入理解，并在此基础上对实际应用的指导。因此，建立再分散过程的描述符无论是对基础研究还是实际应用都有重大意义。

## 2、研究计划和内容

本项目针对再分散体系范围及内在规律不明确难题，围绕金属颗粒在载体表面发生再分散行为描述符的提出展开研究。通过“构建金属-载体再分散体系网络”、“再分散体系热力学及动力学参数分析”及“再分散行为描述符提取”三位一体的研究体系，深入挖掘控制再分散行为的关键参数，提出清晰明确的再分散模型及描述符。具体研究内容如下：

### （1）构建金属-载体再分散体系网络

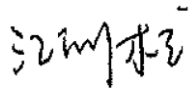
再分散行为涉及三个核心化学组分，即气氛、金属物种和载体。本项目拟着眼于采用贵金属与常用氧化物载体组成金属-载体在氧气气氛下的再分散体系网络，筛选可发生再分散的金属-载体组合。拟采用 X 射线衍射（XRD）和 CO 吸附原位漫反射傅立叶变换红外光谱（CO-DRIFTS）对金属分散度进行初步表征，随后采用球差校正高角度环形暗场扫描透射电子显微镜（AC HAADF-STEM）和 X 射线吸收精细结构谱（XAFS）对金属物种分散状态进行确认。在此过程中，通过调变焙烧温度和负载量等参数，研究不同金属-载体组合分散行为中的临界温度和单位面积最大分散容量，总结分散行为的宏观规律。

### （2）再分散体系热力学及动力学参数分析

再分散过程是金属纳米颗粒电子结构和几何结构在载体表面连续动态变化的过程，其分散路径和最终分散状态与该体系的动力学及热力学参数密切相关。基于上述金属-载体再分散体系网络，拟建立再分散行为与金属颗粒分解温度（ $T_{dec}$ ）、金属颗粒内聚能（ $E_p$ ）、金属单体扩散能（ $E_{ds}$ ）和金属单体结合能（ $E_{bs}$ ）等热力学参数之间的经验关系。其次，在范围可调的升温速率下，通过原位环境电镜（ETEM）、近常压光电子能谱（NAP-XPS）和原位快速 X 射线吸收精细结构谱（Quick-XAFS）等原位/工况技术探究再分散过程电子结构、几何结构和分散度等性质的演化速率，从而得到动力学对再分散过程的影响规律。

### （3）再分散行为描述符提取与验证

再分散行为已有气相原子捕获、表面扩散和吸附质驱动分散等多种机制解释，然而这些机制描述的体系范围相对单一，各机理所描述体系的边界也不清晰，因此，该过程仍缺乏清晰、简洁的理论模型解释。基于上述取得的热力学及动力学参数，拟结合新兴的人工智能和机器学习技术，深入挖掘再分散体系各参数间的数学关系，寻找控制再分散过程的关键参数，并提取出该过程的描述符。随后构建验证集，

	<p>根据描述符预测新的金属-载体组合，通过实验验证其再分散行为是否符合描述符刻画的规律。</p> <p><b>3、可行性分析</b></p> <p>(1) 设计思路和研究方案切实可行。本课题拟从实验上构建金属纳米颗粒氧化再分散体系网络，着重选取催化领域中 7 种常见的贵金属和 12 种氧化物载体进行组合，以单位面积最大分散量和临界分散温度为评价指标，因此该体系网络兼具可行性和代表性。基于实验数据，利用人工智能和机器学习技术，提取再分散过程中的关键描述符，并构建验证集对建立的模型与描述符进行验证，同时预测新的金属-载体再分散组合。该研究方案中关键技术与理论均较为成熟，因此课题设计思路和研究方案切实可行。</p> <p>(2) 预研基础证实可行。在前期的实验基础上，申请人进一步的纳米颗粒再分散体系预研工作。分别以 <math>\text{Fe}_2\text{O}_3</math>、<math>\text{Co}_3\text{O}_4</math>、<math>\text{NiO}</math>、<math>\text{CuO}</math> 和 <math>\text{ZnO}</math> 为载体，调查了 Ru、Rh、Pd、Ag、Au、Pt 和 Ir 分散能力。并筛选 Pt/NiO、Pt/<math>\text{Fe}_2\text{O}_3</math> 等体系研究了再分散过程的粒径效应。通过调变负载量和焙烧温度，发现了同周期元素对应的载体氧化物上金属颗粒再分散行为规律。在此基础上，将再分散行为体系进行延伸，能切实可行地实现预定研究目标。</p> <p>(3) 研究条件切实可行。申请人主要从事单原子催化剂的设计、制备及构效关系研究，通过配位结构调控和电子结构调控，实现了单原子催化剂在电催化、热催化和传感领域的领域，以第一作者或通讯作者（含共同一作）发表学术论文 4 篇，申请发明专利 3 项，授权 1 项。本人现在中国科学院大连化学物理研究所张涛院士团队，团队长期从事负载型高分散贵金属催化剂方面的研究，在单原子催化研究领域一直处于国际先进水平。目前实验室具有成熟完备的单原子催化剂表征研究体系，同时也具有丰富的 ETEM、NAP-XPS、Quick-XAFS 和 D-line XAFS 等原位测试机时，为再分散过程中纳米颗粒的配位环境及电子结构原位变化探究提供了条件。研究团队还与国内外长期从事再分散过程研究的理论及实验研究团队建立了长期友好的合作关系，如中国科学技术大学李微雪教授团队、浙江大学大学肖丰收教授团队和美国新墨西哥大学 Abhaya K. Datye 教授团队，可为本课题中攻关的难题提供技术支持与学术指导。</p> <p><b>4、先进性和创新性</b></p> <p>(1) 在实验上以分散临界温度和单位面积最大分散容量作为明确的参数，构建具有可比性的金属-载体再分散体系网络。基于该网络，分析再分散行为与该过程涉及的各热力学参数之间的经验关系。通过原位环境电镜（ETEM）、近常压光电子能谱（NAP-XPS）和原位快速 X 射线吸收精细结构谱（Quick-XAFS）等原位/工况技术探究再分散过程纳米电子结构和几何结构性质的演化速率，从而得到动力学对再分散过程的影响规律。</p> <p>(2) 以实验获得的再分散行为的热力学和动力学参数为原始数据集，结合人工智能、机器学习等技术，建立具有可解释性的机器学习模型，分析控制再分散行为的关键参数并提出统一、明确的描述符。</p>
<p><b>本人承诺</b></p>	<p>本人承诺：申请表所填内容均真实可靠。对因虚报、伪造等行为引起的后果及法律责任均由本人承担。</p> <p>本人签字：  2025 年 11 月 27 日</p>