

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: 赵佳

研 究 组: 509 组群

学科专业: 物理化学

合作导师: 邓德会

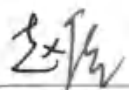
填表日期: 2025 年 11 月 26 日

中国科学院大连化学物理研究所制

姓 名		赵佳		性 别		女	
出生日期				民 族		汉	
学历/学位		研究生/博士		授予博士学位时间		2025. 6. 20	
博士毕业院校		福州大学		(拟) 进站时间		2025. 7. 4	
E-Mail				联系电话			
研究领域							
学习 经历 从本 科起	起止年月	所在单位/专业				所获学位	
	2013. 09- 2017. 06	海南师范大学/化学				学士	
	2017. 09- 2020. 06	哈尔滨师范大学/物理化学(期间在中 科院大连化学物理研究所联合培养)				硕士	
	2021. 09- 2025. 06	福州大学/物理化学				博士	
工作 经历	起止年月	所在单位				职务	
	2025. 7-至今	中国科学院大连化物所				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 / 进站后
	1	数据驱动电催化 CO ₂ 和 N ₂ 共转化定向合成甘氨酸	中国博士后 科学基金面 上	8 万	2026 年- 2028 年	主持	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 / 进站后
1	“Outside-in” Design of Single-Atom Catalysts: Linking Specific Peripheral Geometry to Defined CO ₂ Reduction Performance	Angewandte Chemie Internation al Edition	17	2025/64(34)/ e2025111 84	1/9	入 站 前	

2	Tuning the Inter-Metal Interaction between Ni and Fe Atoms in Dual-Atom Catalysts to Boost CO ₂ Electroreduction	Angewandte Chemie International Edition	17	2025/63(44)/e202411543	2/9 (共同一作)	入 站 前
3	How water molecules occupying the active site of a single-atom catalyst affect the electrochemical reduction of carbon dioxide	Nano Research	9	2023/16/9091-9098	1/6	入 站 前
4	Towards superior CO ₂ RR catalysts: Deciphering the selectivity puzzle over dual-atom catalyst	Journal of Colloid And Interface Science	9.7	2025/680/257-264	1/2	入 站 前
5	Synergy of MoS ₂ -Confined Fe and Co Atoms Enhances Hydrogen Evolution	Advanced Functional Materials	19	2025/35(42)/2503549	2/11 (共同一作)	入 站 前
其他论文发表情况						
6	Metal-free graphdiyne doped with sp-hybridized boron and nitrogen atoms at acetylenic sites for high-efficiency electroreduction of CO ₂ to CH ₄ and C ₂ H ₄	Journal of Materials Chemistry A	9.5	2019/7/4026-4035	1/3	入站 前
7	Copper Dimer Supported on a C ₂ N Layer as an Efficient Electrocatalyst for CO ₂ Reduction Reaction: A Computational Study	The Journal of Physical Chemistry C	3.2	2018/122/19712-19721	1/4	入站 前
8	Modulation of oxygen-etching for generating nickel single atoms for efficient electroreduction of CO ₂ to syngas (CO/H ₂)	Journal of Catalysis	6.5	2023/421/332-341	3/17 (共同一作)	入站 前
9	Single transition metal atom embedded into a MoS ₂ nanosheet as a promising catalyst for electrochemical ammonia synthesis	Physical Chemistry Chemical Physics	3.3	2018/20/9248-9255	1/13	入站 前
3、专利情况:						
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

入站前期及入站后科研情况简介							
	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	首届中国科协青年人才托举工程博士生专项计划		中国科协	2025 年		入 站 前
	2	博士研究生优秀学业奖学金（特等）		福州大学	2025 年		入 站 前
	3	哈尔滨师范大学一等学业奖学金		哈尔滨师范大学	2020 年		入 站 前
	4	硕士研究生国家奖学金		教育部	2019 年		入 站 前
	5	硕士研究生国家奖学金		教育部	2018 年		入 站 前
	博士后研究题目：数据驱动电催化 CO ₂ 和 N ₂ 共转化定向合成甘氨酸						
博士后工作计划	（简述研究计划的可行性、先进性和创新性，理论和现实意义） 1. 研究计划： 本项目拟围绕电催化 CO₂ 和 N₂ 直接转化，构建定向合成甘氨酸的反应体系。研究将以设计反应新路径为核心，聚焦于关键反应中间体的生成，以及 C-C、N-N 和 C-N 等重要化学键的断裂与重组过程。在此基础上，构建二维石墨炔晶格限域单/双金属原子与非金属元素掺杂的复合催化剂，并采用机器学习等方法筛选对甘氨酸具有高选择性的催化体系。进一步结合显式与隐式溶剂化模型，利用恒电位分子动力学模拟等方法揭示产物选择性起源。最终通过实验验证，为 CO₂ 和 N₂ 直接共转化定向合成甘氨酸提供可行性反应机制及有潜力的催化剂。 2. 可行性： 申请人运用密度泛函理论、机器学习和分子动力学模拟等方法，系统研究了电催化 CO₂ 与 N₂ 还原的性能优化及反应机理。 （1）精准调控活性中心配位环境：申请人通过理论计算探究了 Fe 单原子外围几何结构对 CO₂ 还原制 CO 的性能影响，最终提出了一种“由外到内”的单原子设计策略，明确了外围五元环几何结构可以调控反应物种的吸附强度，从而提升 CO₂RR 的性能，最终实验证明了这一结论（<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>, 2025, 64, e202511184）。另外，申请人与合作者也通过设计不同的双原子间距调控双原子间相互作用，平衡反应物种的吸附强度，可以有效促进 CO₂ 还原制 CO 性能（<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>, 2025, 63, e202411543）。这些活性位点的修饰策略为本项目设计多功能活性位点实现 CO₂ 和 N₂ 的共同活化提供了理论设计和实验技术的支持。 （2）C-C 偶联机制：申请人通过将非金属原子掺杂进石墨炔碳骨架中，分别替换 sp 杂化和 sp² 杂化的碳原子为 B 原子或 N 原子，发现掺杂的原子及旁边的碳原子可以作为双活性位点实现 C-C 偶联过程，最终生成了乙烯产物（<i>J. Mater. Chem. A</i>, 2019, 7, 4026）。该研究为设计石墨炔基催化剂和理解 CO₂RR 中 C-偶联反应机制提供了很大的支持。						

	(3) 显式溶剂环境影响机制：申请人通过模拟固液界面，探究了显式溶剂环境对 CO₂RR 制 CO 产物的影响，研究指出显性的水分子会占据反应活性位点，从而对反应中间体的吸附强度及结构产生明显的变化，实现对 CO₂RR 性能的调控[Nano Res. 2023, 16, 9091-9098]。申请人还通过构建固液环境，采用恒电位分子动力学模拟探究了 CO₂RR 制 CO 在双原子体系中的选择性机制，明确了电位效应、显式溶剂效应和 CO*物种覆盖度对反应动力学的影响，表明在电化学反应中这些都是不可忽视的因素，为本计划在探究选择性机制的影响因素部分提供了研究基础[J. Colloid Interface Sci. 2025, 680, 257-264]。 (4) N-N 键断裂机制：通过分子动力学模拟，探究了在真实的电化学反应条件下，N₂ 还原的三种反应机制中 N-N 键断裂的动力学过程，结果表明双原子位点的协同效应，可以促进 N-N 键的断裂。同时，电位效应可以诱导 NH₂NH₂* 中间体构型的转变，降低 N-N 键断裂的能垒。该研究与本计划涉及到的 N₂ 还原过程和重要的 N-N 键断裂过程有一定的关联性，具有可借鉴性[J. Phys. Chem. C, 2022, 126, 5180-5188]。 团队拥有专业的理论计算团队，团队拥有主流的理论计算方法和软件，在催化应用方面具有丰富的经验，能够为本项目提供极大的支持。团队还拥有庞大的实验团队，在电催化能源小分子转化研究方向有着丰富的经验，扎实的基础及专业的技术。综上所述，该计划具有一定的可行性。 3. 先进性和创新性： (1) 提出全新的反应路线，实现从惰性小分子 CO₂ 和 N₂ 直接电化学生成甘氨酸。摆脱现有“预活化碳/氮前驱体协同偶联”的分步法合成策略，首次以 CO₂ 和 N₂ 为唯一碳、氮源，建立定向生成甘氨酸的反应新机制。 (2) 以反应机理为导向构筑多中心协同催化位点。基于二维石墨炔晶格限域单/双金属原子结合非金属掺杂碳骨架，构建多中心协同催化位点，促进 N₂ 活化与 N-N 断裂，延长 NH₂* 中间体寿命，实现 C-C 偶联和形成 COCOOH* 关键中间体。利用高通量计算方法，挖掘催化剂电子特性和几何结构与关键中间体选择性生成之间的关系，从而筛选高效催化剂。 (3) 采用机器学习方法结合恒电位分子动力学及微观反应动力学模拟，揭示甘氨酸产物选择性的决定性因素。在更接近真实电化学反应环境的条件下，通过控制变量探究影响甘氨酸产物选择性的关键因素。 4. 理论与现实意义： 本课题旨在探索以 CO₂ 和 N₂ 为唯一碳、氮源，通过电催化“一步法”合成甘氨酸。理论上，它有望打通惰性小分子协同活化与选择性 C-N 偶联的关键科学问题，拓展电催化转化机理与路径。现实上，该策略在常温常压、可再生电力驱动下运行，可替代依赖氰化物与不可再生醛的 Strecker 工艺，显著降低能耗与环境负担，实现将温室气体转化为高附加值化学品，兼具绿色可持续与产业化潜力。
本人承诺	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。 本人签字：  2025 年 11 月 26 日