


中科院大连化物所“优秀青年博士人才”申请表

姓 名	崔晓菊	性 别	女	出生年月	1990.09	
出生地	陕西西安	婚姻状况	未婚	政治面貌	中共党员	
毕业学校及专业	中国科学院大学 物理化学		学历/学位	研究生/博士		
工作单位及职务	厦门大学/博士后					
联系方式						

学习及工作经历：

（从高中开始填起，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，在职学习请注明）

- 2017年6月—至今 厦门大学，博士后，化学流动站；
- 2012年9月—2017年5月 中国科学院大连化学物理研究所，理学博士，物理化学；
- 2008年9月—2012年6月 四川大学，工学学士，轻化工程；
- 2005年9月—2008年6月 西安市鄠邑区第一中学，高中。

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：

申请人主要从事二维材料催化能源小分子转化相关研究。围绕二维材料的可控制备，通过晶格限域单原子，显著提高了过渡金属在石墨烯晶格里的结构稳定性，实现配位不饱和和过渡金属中心的可控制备，该类材料在室温条件下的甲烷催化转化和染料敏化太阳能电池阴极碘还原反应中展示了优异的活性和稳定性；通过界面限域“铠甲催化”效应，利用 3d 过渡金属与石墨烯电子的相互作用，显著提高了石墨烯壳层的催化活性，该类材料在电解水析氧中表现出可媲美贵金属的高活性及高稳定性。此外，通过热电偶合机制，首次提出了一种能在常温常压下直接制备高纯氢气的电学水气变换过程。申请人目前已在国际知名期刊上以第一作者身份发表论文 5 篇(Nat. Commun., Chem, Angew. Chem. Int. Ed., Energy Environ. Sci.和 Nano Res.)，参与发表 2 篇，申请国内发明专利 3 件，已授权 1 件。先后荣获中科院“三好学生标兵”、博士研究生国家奖学金、“延长石油优秀博士生奖学金”等多项荣誉及奖励。2017 年成功入选“博士后创新人才支持计划”，博士论文荣获 2018 年度“中科院优秀博士学位论文”。

(一) 石墨烯限域单原子铁中心催化甲烷直接转化

创新点：室温甲烷直接催化转化

近年来，随着富含甲烷的天然气、页岩气、可燃冰的大量探测发现，甲烷催化转化生产液体燃料和基础化学品引起了大家的广泛关注，然而，甲烷是最稳定的烷烃分子，其惰性 C-H 键带来的低反应活性给甲烷在温和条件下的活化带来了巨大挑战。为了实现高选择性甲烷活化，反应往往需要在很高的温度下进行。因此，实现甲烷的低温催化转化将对基础研究和工业应用具有重要意义。在本工作中，申请人及合作者设计并构建了一系列二维石墨烯限域的 3d 过渡金属单原子中心催化剂，发现石墨烯限域的单铁中心在室温条件下，以双氧水为氧化剂，可以直接将甲烷催化转化为 C1 含氧化合物（图 1）。借助高分辨液体核磁共振波谱和飞行时间质谱原位表征等手段，发现石墨烯限域的单铁中心可以将甲烷直接转化为 CH_3OH ， CH_3OOH ， HOCH_2OOH 和 HCOOH 等 C1 含氧化合物。该工作发表于《Chem》期刊上（Chem, 2018, 4, 1902），并引起了广泛的关注，英国皇家化学会化学世界网站（Chemistry World）以“Catalyst Converts Methane to Methanol at Room Temperature”为题对该工作进行了亮点报道。同时，厦门大学的王野教授以“Room-Temperature Conversion of Methane Becomes True”为题在《Joule》期刊上专文

(Preview) 对本工作进行了介绍 (Joule, 2018, 2, 1396), 评价该工作是 “A significant breakthrough in methane chemistry (甲烷化学领域的重要突破)”, 并认为该工作不仅为温和条件下甲烷转化高效催化剂的设计提供了新思路, 也极大地鼓舞了甲烷催化转化领域的发展。

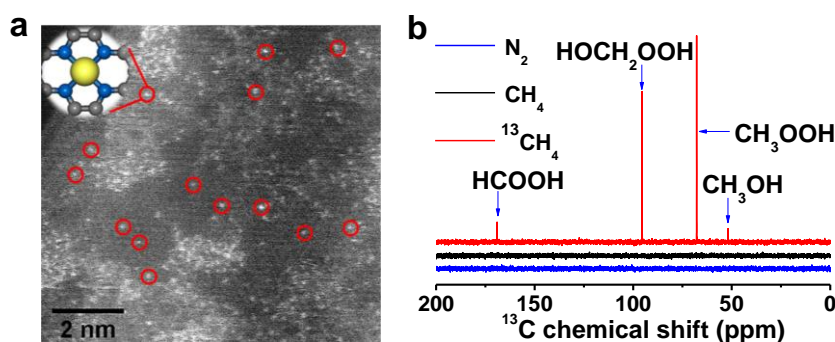


图 1. (a) 石墨烯限域单原子铁中心的高分辨透射电镜图; (b) 以高纯 N_2 、 CH_4 和 ^{13}C 富集的 CH_4 作为反应气体时产物的核磁共振谱。

(二) 电化学水气变换制备高纯氢气

创新点: 通过热电偶合实现了常温常压条件下水汽变换反应制备高纯氢气

作为零碳能源, 氢能源被视为 21 世纪最具发展潜力的清洁能源, 水气变换反应是工业上大规模制取氢气的重要手段, 但该过程通常需要高温 ($180\text{ }^{\circ}\text{C}$ - $250\text{ }^{\circ}\text{C}$) 和高压 (1.0 - 6.0 MPa) 的反应条件, 产生的氢气往往含有约 1%-10% 的 CO 残留, 必须采取进一步的分离纯化才能满足下游工业的要求。在本工作中, 申请人及合作者利用电化学反应原理, 将水气变换反应的氧化还原反应拆分为彼此分离的两个半反应, 首次提出了一种能在常温常压下直接制备高纯氢气的电化学水气变换 (EWGS) 过程 (图 2)。在该体系中, CO 在阳极发生氧化反应, H_2O 在阴极直接被还原生成高纯 H_2 。通过对催化剂的设计和电极结构的优化, 该反应在常温常压条件下实现 99.99% 高纯氢的制备并且达到接近 100% 的产氢法拉第效率。优化后的 PtCu 催化剂在 EWGS 反应中的阳极起始电位降低至接近 0 V, 显著低于电解水的阳极理论电位 1.23 V; 在 0.6 V 时电流密度达到 70 mA/cm^2 , 比商品的 Pt/C 催化剂的活性提升了 12 倍以上; 该催化剂经过 475 小时的稳定性测试后仍能够保持高的活性。该工作为低能耗生产高纯氢气提供了新思路, 相关成果发表在《Nature Communications》期刊上 (Nat. Commun., 2019, 10, 86), 同时已申请中国发明专利 (CN 201810940135.4)。

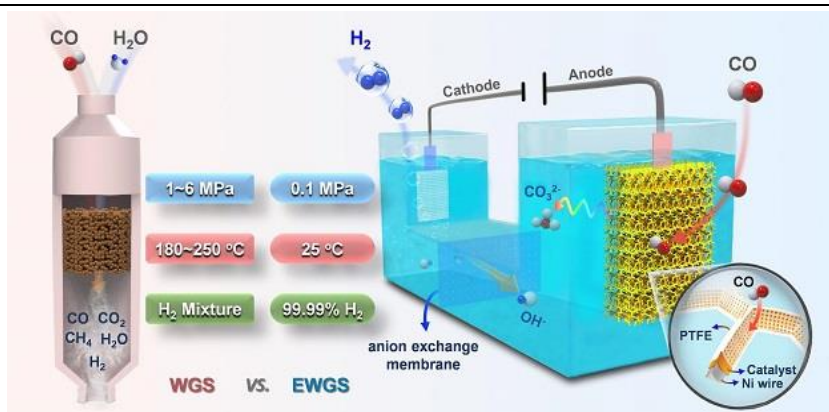


图 2. 室温电化学水气变换反应与传统水气变换反应的示意图。

(三) 单层石墨烯封装 3d 过渡金属催化电解水析氧

创新点：可控制备单层石墨烯封装 3d 过渡金属，在催化电解水析氧中表现出可媲美贵金属的高活性及高稳定性

3d 过渡金属因其成本低廉、储量丰富、理论活性较高而在催化领域受到广泛关注，但是其较差的稳定性也是它们在实际反应中应用所面临的严峻挑战。在本工作中，申请人及合作者利用 SBA-15 的孔道对金属纳米颗粒尺寸的限域作用，通过化学气相沉积法成功实现了均一的单层石墨烯壳层封装 3d 过渡金属及其合金纳米粒子（图 3），将该类材料应用于强碱条件下的电解水析氧反应中，发现单层石墨烯封装铁镍合金催化剂的活性和稳定性均优于贵金属 IrO_2 催化剂。理论计算和实验研究表明，单层的石墨烯壳层极大地促进了电子从金属向石墨烯的转移，从而有效地调变了石墨烯的电子结构，激发了石墨烯碳层的化学和催化活性，同时，由于石墨烯壳层对金属纳米粒子的保护，有效避免了强碱等苛刻环境对金属的腐蚀，这一研究成果为设计和开发高效低成本的 3d 过渡金属基电解水析氧催化剂提供了新思路，相关工作发表在《Energy & Environmental Science》期刊上（Energy Environ. Sci., 2016, 9, 123）。

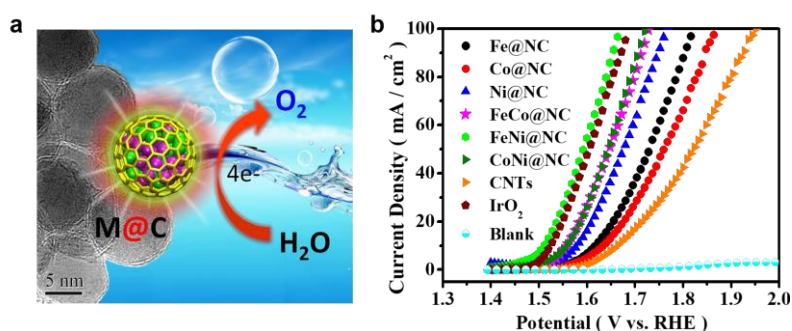


图 3. (a) 单层石墨烯封装 3d 过渡金属催化电解水析氧示意图；(b) 电解水析氧反应活性图。

(四) 石墨烯限域金属-N₄ 中心催化染料敏化太阳能电池阴极碘还原反应

创新点：二维石墨烯“锚定”实现 3d 过渡金属的高活性和高稳定性共存

在催化反应中，催化剂的活性和稳定性有时就像“跷跷板”的两端，很难同时实现高活性和高稳定性。3d 过渡金属理论活性较高，但其较差的稳定性极大限制了其在众多领域的应用。在本工作中，申请人及合作者设计并构建了二维石墨烯限域的 3d 过渡金属单原子中心催化剂，通过高能球磨 3d 过渡金属酞菁分子和石墨烯纳米片，实现利用碳/氮/金属原子之间形成的强共价键来锚定配位不饱和过渡金属中心，形成平面的金属 N₄ 中心结构。由于 N 原子的“桥梁”作用，显著提高了过渡金属在石墨烯晶格里的结构稳定性。通过优化内嵌金属种类，合成出多种石墨烯内嵌单原子金属中心结构材料。该类材料在染料敏化太阳能电池的对电极 I₃⁻ 到 I⁻ 的还原中表现出了良好的催化性能，其中石墨烯限域 CoN₄ 中心的催化活性最优，其电化学测试性能以及组装后的电池功率转换效率（8.40%）均优于贵金属 Pt 催化剂（7.98%），更为可贵的是，在一系列的石墨烯限域单金属中心中，CoN₄ 中心的催化活性和稳定性都处于“火山型”曲线的顶点处，同时实现了催化剂的高活性和高稳定性（图 3），该成果为高活性和高稳定性的 3d 过渡金属基催化剂的设计提供了新思路，相关内容以内封面文章（Inside Back Cover）发表于《Angewandte Chemie International Edition》期刊上（Angew. Chem. Int. Ed., 2016, 128, 6820）。

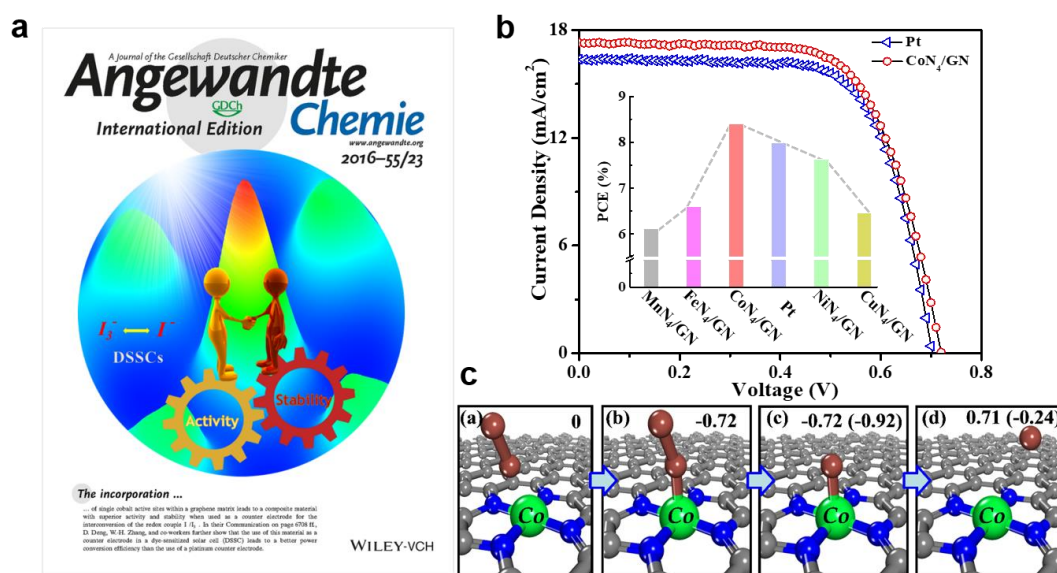


图 3. (a) 石墨烯限域单原子钴催化阴极碘还原反应同时实现高活性和高稳定性的示意图；(b) 染料敏化太阳能电池的性能测试图；(c) 理论计算研究石墨烯限域单原子钴催化 I₃⁻ 到 I⁻ 还原的反应机理。

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) **Xiaoju Cui**[#], Hai-Yan Su[#], Ruixue Chen[#], Liang Yu, Jinchao Dong, Chao Ma, Suheng Wang, Jianfeng Li, Fan Yang, Jianping Xiao, Mengtao Zhang, Ding Ma, Dehui Deng^{*}, Dong H. Zhang, Zhongqun Tian, Xinhe Bao. Room-temperature electrochemical water-gas shift reaction for high purity hydrogen production. *Nature Communications*. 2019, 10, 86.

(总引次数: 0 次; 他引次数: 0 次; 期刊影响因子: 12.353)

(2) **Xiaoju Cui**, Haobo Li, Yan Wang, Yuanli Hu, Lei Hua, Haiyang Li, Xiuwen Han, Qingfei Liu, Fan Yang, Limin He, Xiaoqi Chen, Qingyun Li, Jianping Xiao, Dehui Deng^{*}, Xinhe Bao^{*}. Room-temperature methane conversion by graphene-confined single iron atoms. *Chem*, 2018, 4, 1902.

(总引次数: 6 次; 他引次数: 4 次; 期刊影响因子: 14.104)

(3) **Xiaoju Cui**[#], Jianping Xiao[#], Yihui Wu, Peipei Du, Rui Si, Huaixin Yang, Huanfang Tian, Jianqi Li, Wen-Hua Zhang^{*}, Dehui Deng^{*}, Xinhe Bao. A graphene composite material with single cobalt active sites: A highly efficient counter electrode for dye-sensitized solar cells. *Angewandte Chemie International Edition*, 2016, 55, 6708.

(总引次数: 64 次; 他引次数: 60 次; 期刊影响因子: 12.102)

(4) **Xiaoju Cui**[#], Pengju Ren[#], Dehui Deng^{*}, Jiao Deng, Xinhe Bao^{*}. Single layer graphene encapsulating non-precious metals as high-performance electrocatalysts for water oxidation. *Energy & Environmental Science*, 2016, 9, 123.

(总引次数: 196 次; 他引次数: 189 次; 期刊影响因子: 30.067)

(5) Junying Wang[#], **Xiaoju Cui**[#], Haobo Li[#], Jianping Xiao, Jiang Yang, Xiaoyu Mu, Haixia Liu, Yuanming Sun, Xuhui Xue, Changlong Liu, Xiaodong Zhang^{*}, Dehui Deng^{*}, Xinhe Bao. Highly efficient catalytic scavenging of oxygen free radicals with graphene-encapsulated metal nanoshields. *Nano Research*, 2018, 11, 2821.

(总引次数: 2 次; 他引次数: 1 次; 期刊影响因子: 7.994)

(6) Yunchuan Tu[#], Haobo Li[#], Dehui Deng^{*}, Jianping Xiao, **Xiaoju Cui**, Ding Ding, Mingshu Chen, Xinhe Bao^{*}. Low charge overpotential of lithium-oxygen batteries with metallic Co

encapsulated in single-layer graphene shell as the catalyst. *Nano Energy*, 2016, 30, 877.

(总引次数: 23 次; 他引次数: 20 次; 期刊影响因子: 13.120)

(7) Dehui Deng^{*#}, Xiaoqi Chen[#], Liang Yu, Xing Wu, Qingfei Liu, Yun Liu, Huaixin Yang, Huanfang Tian, Yongfeng Hu, Peipei Du, Rui Si, Junhu Wang, **Xiaoju Cui**, Haobo Li, Jianping Xiao, Tao Xu, Jiao Deng, Fan Yang, Paul N. Duchesne, Peng Zhang, Jigang Zhou, Litao Sun, Jianqi Li, Xiulian Pan, Xinhe Bao^{*}. A single iron site confined in a graphene matrix for the catalytic oxidation of benzene at room temperature. *Science Advances*, 2015, 1, e1500462.

(总引次数: 143 次; 他引次数: 133 次; 期刊影响因子: 11.511)

(#: 共同一作; *: 通讯作者)

查询截止时间: 2019 年 3 月 7 日; 查询数据库: Web of Science

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)

科研项目:

(1) 2017 年度博士后创新人才支持计划, 二维材料限域单原子催化剂低温甲烷活化转化, 60 万元, 主持

(2) 中国博士后科学基金第 64 批面上资助, 二维原子晶体限域金属单原子高效催化甲烷低温转化, 5 万元, 主持

(3) 中国科学院前沿科学重点研究项目, 二维催化材料活性中心的调控及甲烷分子高效转化研究, 250 万元, 参与

(4) 科技部国家重点研发计划, 二维催化材料的表界面调控及 C1 分子高效转化研究, 500 万元, 参与

申请专利:

包信和, 崔晓菊, 邓德会, 邓澆。一种杂原子掺杂的碳封装金属纳米颗粒的制备方法, 中国, 发明专利, 201410658758.4, 已授权。

邓德会, 崔晓菊, 陈瑞雪, 苏海燕, 于良, 包信和。一种电催化水汽变换反应制备高纯氢气的催化剂和装置, 中国, 发明专利, 201810940135.4。

包信和, 崔晓菊, 邓德会, 陈晓琪, 邓澆。一种石墨烯内嵌单分散金属原子的制备方法, 中国, 发明专利, 201410101100.3。

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：

2018年6月 中国科学院优秀博士学位论文

2017年4月 2017年度“博士后创新人才支持计划”

2016年12月 博士研究生国家奖学金

2016年6月 中国科学院大学“三好学生标兵”

2016年5月 中科院大连化学物理研究所“延长石油优秀博士生奖学金”二等奖

2013年5月 中国科学院大学“三好学生”