

项目名称：最薄双金属烯材料显著提升电池性能

项目主要经费来源及数额：国家重点研发计划、国家自然科学基金、中组部千人计划（青年）和北京市杰青项目，共约 900 万

所属领域（在代码前打“√”）

01 数学、物理、天文、力学；√02 化学、化工、纺织；03 材料、冶金；  
04 计算机、自动化、电子、通讯、仪器科学与技术；05 与人体研究有关的生物学、医学、药学；06 农学、林学、畜牧兽医学、水产学和与以上  
研究内容相关的生物学；07 地球、海洋、大气、资源、矿业；08 环境、  
土木、建筑、水利；09 能源、交通；10 航空航天、机械、电气；11 管理  
科学；12 国际合作

合作单位（排序）：美国加州州立大学；美国布鲁克海文国家实验室；  
上海同步辐射光源

项目简介（严格限 500 字以内）：

**1、立项依据：**自石墨烯问世以来，极薄二维材料一直吸引着研究者的广泛关注，促使了多种新型“烯”类材料的诞生。金属烯材料更是科学家们一直寻找的高效催化材料，其对催化相关新能源转换与存储器件的应用至关重要。

**2、主要创新点：**北京大学工学院郭少军团队在新能源转换与存储关键催化材料领域取得重大进展。通过克服金属密堆积的结构倾向及原子间的强作用力，首次实现了世界最薄钨钼合金类石墨烯结构，命名为“金属烯”。该双金属烯材料在碱性条件下展现出目前最高的氧还原催化活性，突破了阴极高过电势和高成本对于相关新能源器件的性能和成本限制，同时实现了卓越的锌-空气和锂-空气电池性能，并在国际上首次提出了量子尺寸效应调控催化性能的新概念。

**3、标志性成果：**2019年9月26日，标志性成果以 PdMo bimetalene for oxygen reduction catalysis 为题，在线发表于《自然》(Nature, 2019, 574: 81-85.)，并被 Phys.org 等多家国际国内科技媒体专题报道，受到各领域研究者的广泛关注。该成果的发表为烯材料家族增添了新的成员，同时也为高性能催化材料的研究带来了新的研究思路和方向，为推动我国燃料电池和锌空电池关键材料研究达到新高度提供了重要的科学基础和技术支撑。

主持人及主要完成人简介：

郭少军，北京大学研究员，博士生导师。吉林大学化学学士，中科院应化所博士，布朗大学博士后，美国国家实验室奥本海默学者。长期在交叉学科领域从事能源材料研究，聚焦于电催化与储能电池。在应变驱动高效能源电催化领域取得具有特色和显著创新性的研究成果。独立工作后以通讯作者在 **Nature** 和 **Science** 等高水平期刊发表论文 100 余篇。h-因子为 87 (WoS)，连续 6 年入选全球高被引科学家榜单 (2014-2019: 化学; 2019: 材料)。曾获首届科学探索奖获得者、英国皇家化学学会会士、英国皇家化学学会 **Journal of Materials Chemistry** 讲座奖、北京首届杰青、爱思唯尔中国高被引学者、国际电化学会应用电化学奖等荣誉和奖励。兼任 **ACS Omega** 副主编，**Science China Materials** 和 **Science Bulletin** 等 7 个国内外杂志的编委。兼任北京化学会理事等学术职务。

对完成项目有特别贡献的 45 岁以下的其他学术骨干情况介绍

## 项目的特色、创新点及标志性成果

### 一、项目背景：

以燃料电池和金属空气电池为代表的新能源转换技术是未来能源体系的基石，也是我国可持续发展战略的重要组成部分。美国能源部通过技术经济分析认为燃料电池规模化应用的瓶颈在于缺乏高效的铂族金属纳米电催化材料用于驱动阴极的氧还原反应。过去十年，通过对纳米电催化剂的结构调控，已涌现出性能优于商用碳载铂的电催化材料，但性能仍无法满足应用需要。目前的电催化机理研究表明，超薄多金属烯类材料具备理想的结构特征。该材料不仅理论上可实现 100% 的原子利用率，同时易调控的应变和电子效应能够实现表面活性位点最优的反应中间体结合能，从而推动其催化性能达到理论极限。因此，多金属烯类电催化剂是科学家们一直寻找的高效催化材料，对促进新能源转换与存储器件的规模化应用至关重要。

### 二、项目特色和创新点：

本项目的特色在于：研发了一类新型的极薄二维金属材料（“金属烯材料”），为烯材料家族增添了新的成员；揭示了应变稳定金属烯结构的机制；实现了碱性介质中目前最高的氧还原催化性能，提升了我国在新能源储存/转换电催化材料领域的影响力。此项目结果表明，金属烯材料在新能源电催化领域具有巨大的开发潜力，同时为金属烯在其他研究领域的发展提供了重要的理论支持和实验依据。

本项目的创新点包括：

(1) 首次获得了亚纳米厚的“双金属烯材料”。基于团队多年液相体系金属纳米晶体的可控合成经验，克服了金属密堆积的结构倾向及原子间强作用力，得到了亚纳米厚且高度几何卷曲的钌钼金属烯材料；基于精细结构表征及分子动力学模拟，首次提出卷曲的几何形貌所引起的拉伸应变有利于稳定具有超高表面自由能的钌钼双金属烯，为金属烯类材料的深入研究奠定了理论基础。

(2) 实现了碱性介质中目前最高的氧还原催化性能。钌钼双金属烯的氧还原半波电位达到 0.95 V，为目前报道的最高值且接近基于氧结合能理论预测的极限；钌钼双金属烯的电化学活性面积高达 138.7 m<sup>2</sup>/g<sub>Pd</sub>；在 0.95 V 电位下质量活性达到 0.645 A/mg<sub>Pd</sub>，分别高出商用碳载铂和碳载钌 16.9 和 107.5 倍。模拟工况电化学循环扫描三万圈后，性能衰减不超过 30%。

当用作阴极催化材料时，钼钨双金属烯显著提升了锌空和锂空电池的充放电性能。

(3) 国际上首次提出了量子尺寸效应调控催化性能的新概念。以往纳米金属电催化剂的性能调控依赖于合金效应和应变效应，以达到最优化的吸附能。本项目首次提出量子尺寸效应对亚纳米级电催化剂中间体吸附能的调控作用。随着研究者们对电催化剂的结构调控趋于原子级，这一新效应将在新能源储存/转化电催化研究领域发挥重要的指导作用。

### 三、标志性成果

2019年9月25日，本项目标志性成果以 PdMo bimetalene for oxygen reduction catalysis 为题，在线发表于《自然》(Nature, 2019, 574: 81-85)，并被 Phys.org 等多家国际国内科技媒体专题报道，受到各领域研究者的广泛关注。《中国科学化学》(Science China Chemistry) 以 ‘Bimetalene’ advances oxygen electrocatalysis 为题，对本项目的研究予以正面评价；文中指出“金属烯是一类非常具有前景的新能源电催化纳米材料”，并认为“将激起全领域研究金属烯类材料的热情”。英国物理学会官网发表了题为 Breakthrough in electrocatalysts reported 的评论文章，认为本项目所研发的金属烯类材料将在能源电催化领域发挥重要作用。X-mol 官网发表了题为《2D 材料家族新成员“双金属烯”，惊艳的 ORR 电催化剂》，文中指出“该研究结果为下一代高性能低成本的氧还原反应催化剂的设计方案提供了一个新的思路。”

#### 证明材料目录：

(1) Nature 代表性论文：M. Luo, Z. Zhao, Y. Zhang, Y. Sun, Y. Xing, F. Lv, Y. Yang, X. Zhang, S. Hwang, Y. Qin, J. -Y. Ma, F. Lin, D. Su, G. Lu, S. Guo\*, PdMo bimetalene for oxygen reduction catalysis, Nature, 2019, 574: 81-85.

(2) 英国物理学会官网 Phys.org 专稿：Weijian Huang. Breakthrough in electrocatalysts reported. (Sep. 26, 2019). <https://phys.org/news/2019-09-breakthrough-electrocatalysts.html>

(3) Science China Chemistry 专稿：Dehui Deng, ‘Bimetalene’ advances oxygen electrocatalysis, 10.1007/s11426-019-9637-x.

(4) X-mol 专稿：2D 材料家族新成员“双金属烯”，惊艳的 ORR 电催化剂. (Oct. 18, 2019) <https://www.x-mol.com/news/19182>.