


姓名	肖建平	性别	男	出生年月	1983/03/11	
出生地	四川省南充市	婚姻状况	已婚	政治面貌	党员	
国籍	中国	从事专业及关键词	理论催化；计算催化；电催化；计算机模拟方法；多相催化；微动力学模型			
现工作单位及职位	西湖大学 研究员					
人事关系所在单位	西湖大学					
<p>教育经历： （从本科开始按时间正序填写，内容包括时间、单位、学位、所学专业时间段要连续，准确到月份，时间段不连续的需说明原因）</p> <p>学士 2003年09月-2007年06月 重庆大学 冶金工程 硕士 2007年09月-2009年06月 重庆大学 冶金工程 博士 2009年10月-2013年08月 德国布莱尔大学 计算材料科学</p>						
<p>工作经历： （请按照时间正序填写工作经历、从事专业、专业技术职务情况，时间段要连续，准确到月份，时间段不连续的需说明原因）</p> <p>博士后 2013年10月-2015年10月 中国科学院大连化学物理研究所 博士后 2015年11月-2017年10月 美国斯坦福大学 研究员 2017年11月-至今 西湖大学</p>						

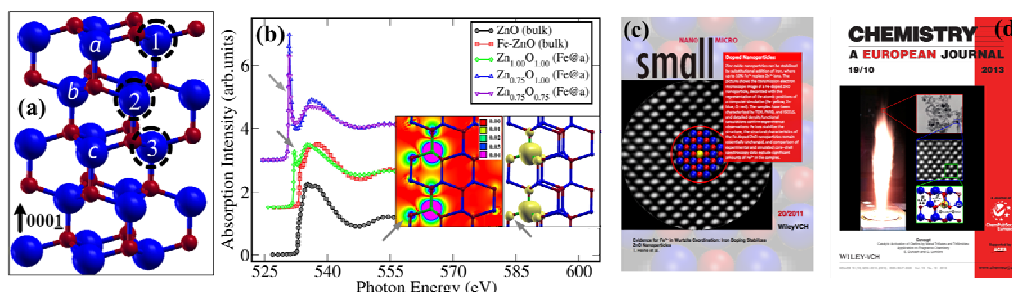
如内容较多，本栏目填不下时，可另纸接续（下同）。

主要学术成果、创新成果简介（主要阐述申请人取得的研究成果及贡献）：

申请人通过第一性原理电子结构计算为手段，主要从事了两个方面的研究工作。第一方面(博士阶段)的研究主要是通过电子结构计算，并与实验合作研究了固体材料表面的稳定性；第二方面(博士后阶段)主要是研究了固体材料表面的催化性质(包括限域环境下的催化和电催化)。累积发表学术论文近 47 篇，第一作者论文(包括同等贡献)17 篇，包括 Nature Communications, Phys. Rev. Lett., J. Am. Chem. Soc., Angewandte Chemie 等，另外 JACS 和 Angewandte Chemie 这两篇论文分别被编辑评选为 spotlight 和 Inside-back-cover 文章，并且 JACS 和 Nature Communication 这两篇文章分别入选了 ACS 出版的专集“Nanoreactor”和 Nature Catalysis 专集之“Understanding Catalysis”。

1. 氧化锌极性表面稳定新机制

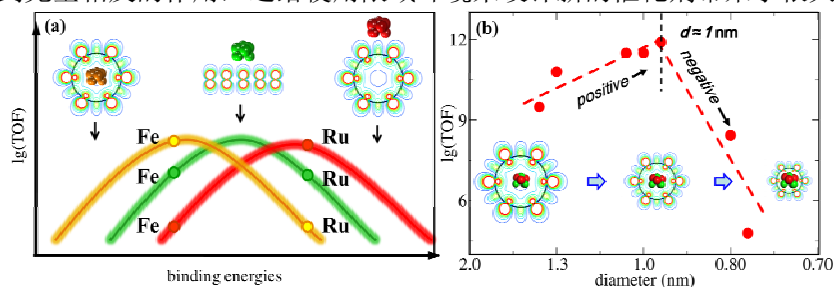
氧化锌是一种非常重要的半导体功能材料。纳米尺度的氧化锌材料已经在生物、医学、化工(催化)等领域有着广泛的应用。然而纳米尺度的氧化锌在水溶液中很不稳定，实验发现掺杂微量的 Fe 元素可以对氧化锌的稳定性有很大的提高，但是 Fe 元素对氧化锌稳定性提高的机制一直困惑着科研人员。



申请人通过电子结构的理论计算发现 Fe 对氧化锌的极性表面稳定性有很大的影响，其主要原因是在氧化锌次表层的 Fe 元素(如图 a 和 b 所示)是以 Fe³⁺的形态存在，Fe³⁺能够减小氧化锌极性表面的偶极矩，进而提升其稳定性。研究内容的前期工作分别作为卷首文章(Frontispiece)发表在 Small，和作为封面文章(Front Cover)发表在 Chem. Eur. J 上，其研究的最终结果发表在 Phys. Rev. Lett. 上，并首次提出了自适应的“变价金属”对极性表面稳定新机制。

2. 限域空间催化的新概念 -- “限域能”

2008 年实验研究首次发现碳纳米管的限域作用可以提高 Fe 的费-托反应活性(JACS 2008)。然而，实验研究同时也发现碳纳米管限域效应可以抑制很多反应，比如以金属 Ru 作为催化剂的费-托反应就会受到抑制。因为很难理解为什么限域效应对同一化学反应会因使用不同的催化剂而起到完全相反的作用，这给使用限域环境来设计新的催化剂带来了很大的挑战。

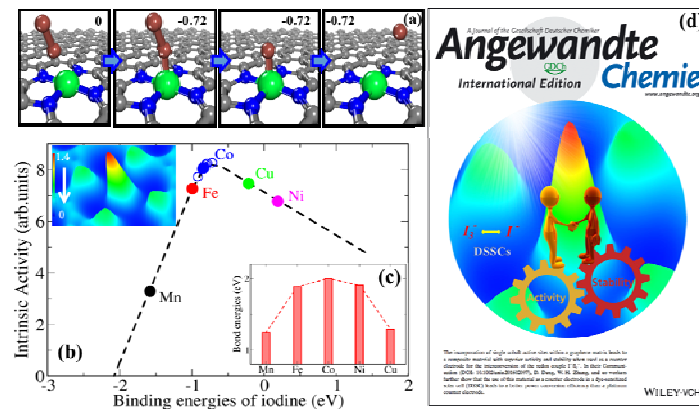


本项目申请人在博士后研究阶段，采用第一性原理的理论计算为手段，研究发现在不同的 Fe 粒子尺寸、不同氧覆盖度、不同的碳纳米管管径的情况下，碳纳米管内氧和铁的结合能总是要比负载在碳纳米管外壁更弱。更令人惊讶的发现是对于其他小分子(N₂ 和 CO)在碳纳米管的限域空间内，其在多种催化剂表面上的解离吸附能也是要比负载的情况弱。因此申请人提出了一个新的概念-“限域能”（在限域空间中结合能减弱的部分）。这个全新的概念结合微观动力学模拟，可以很好地同时解释在催化反应中观察到的正面促进和负面抑制作用。在火山曲线的左侧，在碳纳米管的限域空间内催化反应得到促进；而在火山曲线右侧，催化反应都会被抑制(如图 a 所示)。这一概念能够同时解释来自不同研究组的超过 10 个独立的实验研究

结果。其研究成果以亮点论文(spotlight)的方式发表在 JACS, 并且申请人还深化了限域能这个概念的应用, 首次提出了限域催化中的尺寸效应(如图 b 所示, 发表于 Chemical Science 2017)。并且这一概念也被成功应用到二维限域空间中(研究工作发表在 PNAS 2017)。申请人还指导一名博士研究生, 与实验合作在很多的国际著名期刊上发表过文章, 包括 Science, Nano Letters, ACS Nano, Chemical Science, 和 Energy & Environmental Sciences。

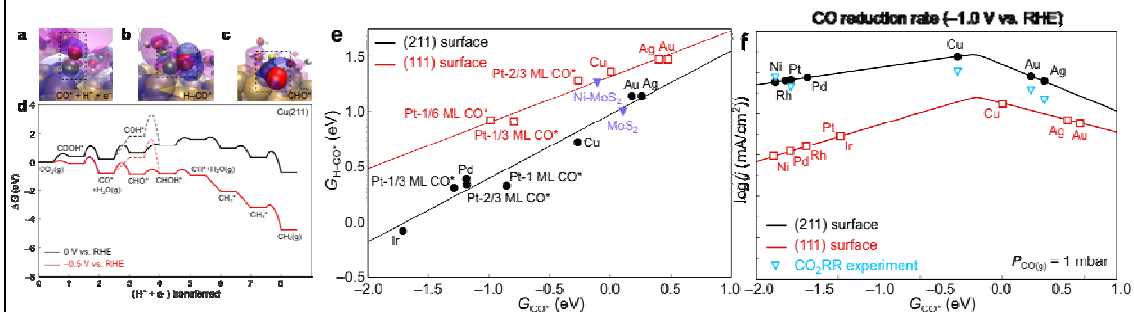
3. 利用微环境同时提升催化剂的活性和稳定性

设计高活性高稳定性的催化剂一直是非常挑战的任务。这主要的原因是对于具有很好活性的催化剂, 一般情况下其表面反应物会大量的吸附和累积, 进而使得催化剂表面被毒化或者产生相变, 最终使得催化剂失活。申请人和实验合作设计出了一系列的过渡金属(Mn、Fe、Co、Cu 和 Ni)内嵌于石墨烯的单原子催化剂, 由于特殊的内嵌类卟啉结构使得不同催化剂活性中心的稳定性具有类似“火山型”曲线的趋势(如图 c 所示)。这一趋势和催化剂的本征反应活性完全耦合在一起, 即当催化剂的活性达到最高的时候, 其稳定性也达到最好(如图 b 所示)。此研究成果以内封面文章(Inside Back Cover)发表于 Angewandte Chemie 国际版上。



4. 二氧化碳电化学还原的选择性模型

通过对二氧化碳进行电化学还原转化, 可以得到碳氢化合物和醇类等液体燃料或者高附加值的化学品。这一过程是通过“人工光合作用”得到清洁可再生能源的核心反应之一。从电化学催化性能的角度分析, 我们希望能够降低副产物和抑制副反应, 比如析氢反应。CO 在电极表面的结合能已经被证实是二氧化碳还原过程的总体活性的描述符(descriptor), 然而对于二氧化碳还原过程的选择性一直没有非常系统的研究工作。申请人开发了高效的电化学模拟新方法, 研究得到了在不同外加电压的情况下 CO₂ 还原和 H 还原的活化能, 首次得到了描述 CO₂ 电化学还原和析氢反应的选择性的新方法, 并和实验研究结果非常吻合(如图 f 所示), 此研究成果发表于 2017 Nature Communications, 并且得到同行的高度认可, 入选了 Nature Catalysis 出版的研究专集-“Understanding Catalysis”。



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。

序号	著作 (#: 同等贡献; *: 通讯作者)	期刊	年份	2016 年期刊 影响因 子	引用次 数(他 引)
1	Understanding trends in electrochemical carbon dioxide reduction rates (collection in Nature Catalysis); Liu XY [#] , Xiao JP[#] , Peng HJ, Hong X, Chan K, Nørskov JK*	Nature Communications	2017	12.124	12 (8)
2	Stabilization Mechanism of ZnO Nanoparticles by Fe Doping; Xiao JP , Kuc A, Frauenheim T, Heine T*	Physical Review Letters	2014	8.462	9 (9)
3	Toward Fundamentals of Confined Catalysis in Carbon Nanotubes; (spotlight article selected by editor); Xiao JP , Pan XL*, Guo SJ, Ren PJ, Bao XH*	Journal of the American Chemical Society	2015	13.858	50 (44)
4	A Graphene Composite Material with Single Cobalt Active Sites: A Highly Efficient Counter Electrode for Dye-Sensitized Solar Cells (Inside Back Cover); Cui XJ [#] , Xiao JP[#] , Wu YH, Du PP, Si R, Yang HX, Tian HF, Li JQ, Zhang WH*, Deng DH*, Bao XH	Angewandte Chemie-International Edition	2016	11.994	39 (36)
5	Size-dependence of carbon nanotube confinement in catalysis; Xiao JP , Pan XL*, Zhang F, Li HB, Bao XH*	Chemical Science	2017	8.668	3 (3)
6	Visualizing electronic interactions between iron and carbon by X-ray chemical imaging and spectroscopy; Chen XQ [#] , Xiao JP[#] , Wang J, Deng DH*, Hu YF, Zhou JG, Yu L, Heine T, Pan XL, Bao XH*	Chemical Science	2015	8.668	12 (6)
7	Toward Rational Design of Catalysts Supported on a Topological Insulator Substrate; Xiao JP* , Kou LZ, Yam CY, Frauenheim T, Yan BH	ACS Catalysis	2015	10.614	7 (3)
8	Activity and Synergy Effects on a Cu/ZnO(0001) Surface Studied Using First-Principle Thermodynamics; Xiao JP* , Frauenheim T	Journal of Physical Chemistry Letters	2012	9.353	12 (7)
9	CO ₂ reduction at low overpotential on Cu electrodes in the presence of impurities at the subsurface; Xiao JP* , Kuc A, Frauenheim T, Heine T	Journal of Materials Chemistry A	2014	8.867	15 (12)

10	Fe-Doped ZnO Nanoparticles: The Oxidation Number and Local Charge on Iron, Studied by Fe-57 Mo beta bauer Spectroscopy and DFT Calculations; Xiao JP , Kuc A, Pokhrel S, Madler L, Pottgen R, Winter F, Frauenheim T, Heine T*	Chemistry -A European Journal	2013	5.317	11 (4)
11	Structural Evolution of Cu/ZnO Active Sites: From Reactive Environment to Ultrahigh Vacuum; Xiao JP* , da Rosa AL, Zhang RQ, Teoh WY, Frauenheim T	ChemCat Chem	2014	4.803	2 (1)
12	Temperature-Mediated Magnetism in Fe-Doped ZnO Semiconductors; Xiao JP , Frauenheim T, Heine T, Kuc A*	Journal of Physical Chemistry C	2013	4.536	12 (12)
13	Activation mechanism of carbon monoxide on alpha-Fe2O3 (0001) surface studied by using first principle calculations; Xiao JP* , Frauenheim T	Applied Physics Letters	2012	3.411	2 (2)
14	Theoretical Insights into CO2 Activation and Reduction on the Ag(111) Monolayer Supported on a ZnO(000(1)under-bar) Substrate; Xiao JP* , Frauenheim T	Journal of Physical Chemistry C	2013	4.536	17 (15)
15	Theoretical prediction of carbon dioxide reduction to methane at coordinatively unsaturated ferric site in the presence of Cu impurities; Xiao JP* , Frauenheim T	Physical Chemistry Chemical Physics	2014	4.123	2 (1)
16	Evidence for Fe2+ in Wurtzite Coordination: Iron Doping Stabilizes ZnO Nanoparticles (Frontispiece); Xiao JP , Kuc A, Pokhrel S, Schowalter M, Parlapalli S, Rosenauer A, Frauenheim T, Madler L, Pettersson LGM, Heine T*	Small	2011	8.643	24 (13)
18	Selective conversion of syngas to light olefins; Jiao F, Li JJ, Pan XL*, Xiao JP , Li HB, Ma H, Wei MM, Pan Y, Zhou ZY, Li MR, Miao S, Li J, Zhu YF, Xiao D, He T, Yang JH, Qi F, Fu Q, Bao XH*	Science	2016	37.205	119 (112)
32	Theoretical Characterizations of Spinelns Containing Iron and Vanadium via ab initio Calculations; Xiao JP* , Xie B, Wang Y	ISIJ International	2013	1.11	1 (1)

已承担或正在承担的科研项目：

(项目来源、项目名称、经费、个人在其中的作用)

青年科学基金项目 铜电极表面次表层残留氧元素对二氧化碳电还原影响的理论研究 25 万 主持

重要科研获奖情况:

(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)

序号	名项目称	奖项	时间	本人排名/ 总人数
1	To recognize the accomplishments and promise of researches in the early stages of independent career	The Rising Star in Computational Materials Science Prize (finalist, recipient will be annouced after Oct.31 2018)	2018	未知/未知
2	氧化锌极性表面的稳定性和反应性的理论研究	中国留学基金委建设高水平大学项目(公派留学)	2009	未知/未知
3	碳纳米管限域的理论研究	中国科学院大连化学物理所年度优秀博士后报告口头报告奖	2014	未知/3
4	碳纳米管限域的理论研究	第十五届国际量子化学会议优秀海报奖	2015	未知/未知

担任国际学术会议重要职务及在国际学术会议做大会报告、特邀报告情况, 其他获奖及荣誉称号情况:

2018, [Sydney, Australia] Invited from Prof. Sean Smith (ACEMD18) (oral)
 2018, [Sydney, Australia] Invited from Prof. Jun Huang (CatalSymp2018) (oral)
 2018, [Hangzhou, China] Invited from Prof. Xin Xu (31th CCS annual meeting) (oral)
 2018, [Lanzhou, China] Invited talk from Prof. Fuwei Li (Chem, LICP) (oral)
 2018, [Suzhou, China] Invited talk from Prof. Fuwei Li (Chem, LICP) (oral)
 2018, [Shenzhen, China] Invited from Prof. Xianzhu Fu (MSE, SZU) (oral)
 2018, [Shenzhen, China] Invited from Prof. Lele Duan (Chem, Sustech) (oral)
 2018, [Guangzhou, China] Invited from Prof. Kai Yan (ES, SunYatSen) (oral)
 2017, [Hangzhou, China] Invited from Prof. Jianguo Wang (ChemE, ZJUT) (oral)
 2017, [Hangzhou, China] Invited from Prof. Xinhui Xia (MSE, Zhejiang Univ.) (oral)
 2017, [Chengdu, China] Invited from Prof. Wei Chu (ChemE, Sichuan Univ.) (oral)
 2017, [Chongqing, China] Invited from Prof. Xuewei Lv (MSE, Chongqing Univ.) (oral)
 2017, [Chongqing, China] Invited from Prof. Zhidong Wei (ChemE, CQU) (oral)
 2017, [Hong Kong, China] Invited from City University of Hong Kong (oral)
 2017, [Hangzhou, China] Invited from Westlake Institute of Advanced Study (oral)
 2017, [Shenzhen, China] Invited from the CUHK, Shenzhen (oral)
 2016, [Shanghai, China] Invited from Prof. Xinhe Bao, (Fudan University) (oral)
 2016, [Canberra, Australia] Invited from Australian National University (oral)
 2014, [Hang Zhou, China] The 17th National Conference on Catalysis of China (oral),
 2014, [Hong Kong, China] The William Mong Nano Seminar Series, HKUST (oral),