

2026 年度拟提名陕西省自然科学奖项目公示内容

一、项目名称

光反应界面电子结构调控与关键反应中间体形成机制

二、提名者及提名意见

提名者：申烨华，西北大学，教授，化学

提名意见：

项目团队围绕复杂光反应体系中界面电子结构调控、光生载流子迁移、动态反应中间体形成及复杂分子选择性转化等基础科学问题开展系统研究。构筑了多类型异质界面，揭示了界面电子耦合、极化效应及多尺度界面结构对光生载流子定向迁移和表面反应活化的调控规律；发展了基于从头算分子动力学的动态反应路径解析方法，捕获并解析了复杂光催化反应中的关键瞬态中间体，揭示了析氧过程中含氧物种形成与氧氧键生成机制；进一步将上述机制认识拓展至天然木质素选择性转化，揭示了分子吸附构型、自由基中间体演化与 C-C/C-O 键选择性活化之间的内在关联，建立了天然高分子光催化定向转化的新理论。项目成果发表于 *Nat. Commun.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*ACS Catal.* 等国际期刊，论文受到国内外同行持续关注和引用，并获得多位中国科学院院士、加拿大皇家科学院院士及国际知名学者的积极评价。项目研究成果拓展了光催化界面调控和复杂反应机制研究的基础理论，为光催化材料理性设计、复杂反应路径调控及生物质资源高值利用提供了重要科学依据，具有较强的原创性和学术价值。

提名该项目为陕西省自然科学奖一等奖。

提名者：黄宇，中国科学院地球环境研究所，研究院，环境科学与工程

提名意见：

在“双碳”目标和可持续能源与资源高值利用需求持续增长的背景下，高效光催化转化是实现太阳能利用、清洁能源制备和生物质资源高值化利用的重要技术途径。项目团队（1）发展了配位聚合物原位衍生与异质组装方法，实现了光催化材料形貌和界面结构的调控；（2）提出 S 型异质结等界面调控策略，揭示了界面电荷迁移与光生载流子分离的关系；（3）利用第一性原理分子动力学解析反应动态过程，识别了关键中间体并揭示其演化规律；（4）构筑了面向木质素选择性转化的异质光催化体系，阐明了关键化学键活化与断裂机制。项目论文发表于 *Nat. Commun.*、*Angew. Chem. Int. Ed.* 等，总被引 3 万余次，20 余篇为 ESI 高被引论文；受邀 30 余次会议报告。项目成果在光催化界面调控、反应机制研究及生物质选择性转化等方面具有较好的原创性和科学价值，总体研究水平达到国际先进，部分研究成果具有国际领先水平，对推动光催化基础研究及太阳能驱动资源高值转化具有积极意义。

提名该项目为陕西省自然科学奖一等奖。

三、项目简介

该项目属于能源化工技术领域的光催化与催化化学方向。

光催化过程利用太阳能驱动化学反应，是实现可持续能源转化、环境污染治理以及生物质资源高值利用的重要技术途径。光催化水分解制氢、析氧以及复杂有机分子选择性转化等过程均涉及光生载流子的产生、界面迁移和多电子反应等关键动力学步骤。然而，由于光催化反应具有瞬态性、多电子转移和多相界面耦合等特点，关键反应中间体的形成演化机制、界面电子结构调控规律以及反应路径选择原则仍缺乏系统认识，限制了高效光催化体系的理性设计。针对上述基础科学问题，项目围绕“界面电子结构调控关键反应中间体形成及选择性转化机制”这一核心科学问题，结合原位光谱分析、密度泛函理论计算和从头算分子动力学模拟等研究手段，系统开展了环境污染物光催化降解、太阳能水分解以及生物质选择性转化等典型光催化过程研究。项目团队围绕多尺度界面结构、界面电子行为及动态反应过程开展研究，揭示了异质界面对光生载流子迁移和反应活化的调控规律，发展了关键中间体识别与反应路径解析方法，阐明了天然高分子选择性化学键活化及自由基演化机制，为高效光催化材料设计提供了新的科学认识。

科学发现一：揭示异质界面电子结构调控光生载流子迁移与反应活化规律，建立多尺度界面工程促进光催化转化的新机制。光催化反应性能不仅取决于材料光吸收能力，更受到界面结构、电荷迁移行为以及表面反应过程的协同影响。然而，复杂异质界面中结构调控、电荷行为与催化性能之间的内在联系尚缺乏系统认识。针对这一问题，项目团队围绕界面结构调控与电子行为演化规律开展研究，构筑了多种具有特定电子耦合特征的光催化异质体系，揭示了界面结构促进载流子分离和反应活化的内在机制。项目团队首先利用金属氧簇结构优势，构建 Ti_{32} 氧簇/ CdS 复合光催化体系，揭示了氧簇界面对半导体电子结构调控及光生载流子分离促进作用，实现了界面结构调控与催化性能提升之间的关联。进一步引入压电极化效应，构筑 Ti_{32} 氧簇/ BaTiO_3 / CuS 复合异质体系，发现外场诱导的界面电荷调控能够促进光生载流子定向迁移，提出了压电效应协同强化光催化过程的新机制。在上述研究基础上，项目团队进一步发展原子级界面调控策略，揭示异质界面电子重构形成内建电场并促进载流子定向迁移的规律，实现了从界面结构设计到电子行为调控的理论认识提升，为高效光催化体系构筑提供了科学依据。相关成果发表于：*Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 61, e202205312; *Adv. Mater.* 2018, 30, e1705713; *Appl. Catal. B: Environ.* 2021, 291, 120019; *Constr. Build. Mater.* 2024, 432, 136684 等。

科学发现二：建立复杂光催化多电子反应动态中间体识别方法，揭示析氧过程中关键含氧物种形成与演化规律。光催化析氧反应涉及多步质子耦合电子转移过程，其真实反应路径和关键中间体长期以来主要依赖静态理论计算和间接实验分析，难以反映复杂水环境下活性物种的动态演化过程。针对这一科学问题，项目团队发展了基于从头算分子动力学的动态反应过程解析方法，将时间演化模拟与电子结构分析相结合，实现了复杂光催化界面中瞬态中间体的识别和反应路径

追踪。通过构建真实催化界面模型，项目团队揭示了光催化析氧过程中含氧活性物种的动态形成过程，明确了传统静态模型难以捕获的关键中间体演化行为，发现了水分子活化、氧物种转化以及氧氧键形成过程中的动态调控规律。研究突破了传统主要依赖吸附能和热力学参数分析反应机制的局限，通过动态反应过程模拟识别关键中间体并解析反应路径，为复杂光催化反应机制研究提供了新的研究方法。相关成果发表于：*Nature Commun.* 2024, 15, 10411; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e202309066; *Small* 2025, 21, 2408286; *J. Phys. Chem. Lett.* 2025, 16, 10049 等。

科学发现三：揭示复杂生物质分子选择性化学键活化与自由基演化机制，建立天然高分子光催化定向转化新理论。木质素作为自然界唯一可再生芳香族聚合物，其高值利用受到复杂结构中稳定 C-C/C-O 键难以选择性活化的限制。传统热催化过程容易诱导自由基随机重组和非选择性裂解，而光催化过程中活性物种如何识别特定化学键并控制反应路径仍缺乏深入认识。针对上述问题，项目团队建立了理论计算与实验验证相结合的研究体系，通过密度泛函理论计算、同位素示踪、原位光谱分析以及关键中间体捕获等方法，系统揭示了光生载流子诱导自由基形成、活性物种传递以及 C-C/C-O 键选择性断裂过程。研究发现，催化界面与芳香结构之间的电子耦合作用能够调控分子吸附构型，促进目标化学键选择性弱化；同时，关键自由基中间体的生成和演化决定了不同断键路径及产物选择性。基于上述认识，项目团队进一步研究了界面电子结构对自由基中间体形成和化学键断裂的影响，揭示了天然高分子光催化选择性转化的相关规律，为高值化学品的定向制备提供了理论依据。相关成果发表于：*Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63, e202410382; *ACS Catal.* 2023, 13, 13941-13954; *Chem. Eng. J.* 2025, 523, 168291; *Chem. Eng. Sci.* 2026, 335, 124465 等。

项目团队围绕复杂光催化体系中的界面电子结构、反应中间体及选择性转化等基础科学问题开展了系统研究，揭示了界面电子结构对光生载流子迁移和反应过程的影响规律，阐明了关键反应中间体的形成及反应路径，为光催化材料的设计和反应机制研究提供了理论依据。项目实施期间，团队以第一作者或通讯作者发表 SCI 论文 300 余篇，其中包括 *Science*、*Nature Commun.*、*Angew. Chem. Int. Ed.* 等国际期刊论文，论文总被引 3 万余次；授权中国发明专利 60 余项；主持国家高层次人才项目（2 项）、国家自然科学基金联合基金重点项目（2 项）、面上项目以及陕西省杰出青年科学基金等科研项目。项目成果受到国内外学术界广泛关注，研究成果被国内外同行引用并给予积极评价。近 5 年来项目第一完成人受邀在国内外学术会议作大会报告、主题报告和邀请报告 30 余次，项目团队受邀担任 *Green Chem. Eng.*、《化工进展》、《过程工程学报》等国内外学术期刊副主编及编委等学术职务。

四、客观评价

（一）代表性研究成果受到国内外同行关注，形成了持续的学术影响

项目团队围绕光反应界面电子结构调控与关键反应中间体形成机制的代表性成果发表于 *Angew. Chem. Int. Ed.* 3 篇、*Adv. Mater.* 1 篇、*Constr. Build. Mater.* 1 篇。截至目前，项目论文已被国内外同行引用 3 万余次，ESI 高被引论文 20 篇。研究不仅被同行作为一般性文献引用，而且被国内外学者用于阐述光催化异质结、界面电荷行为、动态反应机制及木质素光催化降解等领域的重要科学问题，多篇综述和研究论文将项目成果作为相关领域的代表性工作进行讨论。项目研究得到中国科学院院士李灿教授、加拿大皇家科学院/工程院院士 Jiuju Zhang 教授、意大利林琴国家科学院院士 Gianfranco Pacchioni 教授、加拿大工程院外籍院士邱学青教授、欧洲科学院外籍院士余家国教授等国内外同行的关注和引用。具体评价如下：

（二）国内外同行将项目构筑的异质结及界面调控体系作为光催化材料设计的代表性工作，肯定了其在促进电荷分离和增强光催化性能方面的作用

围绕光生载流子分离与界面电荷迁移，发展的配位聚合物原位衍生、多维异质组装及界面结构调控等方法，构筑的分级中空结构、异质结及具有特殊界面电子结构的光催化材料，受到国内外同行广泛关注：（1）欧洲科学院外籍院士、国家高层次人才、中国地质大学（武汉）余家国教授在 *Nature Rev. Chem.*、*Angew. Chem. Int. Ed.* 等论文中数次将项目构筑的体系作为 S 型异质结光催化材料的代表性研究进行讨论（代表性引文 3，附件 2-3-1）；（2）国家高层次人才、福建农林大学帅李教授在 *Nature Commun.* 中引用项目结构设计，“有机分子与框架材料之间的结构构筑和界面形成有效连接”（代表性引文 4）；（3）*Chin. J. Catal.* 编委、华南农业大学李鑫教授在 *Angew. Chem. Int. Ed.* 研究中讨论 S 型异质结时，提出我们“构建的 S 型异质结有利于促进光生载流子的分离与传输并保持较强的氧化还原能力”（附件 2-3-2）；（4）国家高层次人才、中科院金属所李峰研究员在 *Nat. Energy* 中将本项目工作作为石墨烯多孔材料构筑的典型示例，为多孔材料的结构设计提供了参考（代表性引文 8）；（5）*Chin. J. Catal.* 编委、武汉理工大学曹少文研究员在 *Chin. J. Catal.* 中专门介绍了项目团队发展的溶剂蒸发-沉积方法，并以项目构筑的 p-CN/P-PDI S 型异质结为典型案例，详细讨论了该方法实现半导体均匀负载及异质界面构筑的特点（附件 2-3-3）；（6）马来西亚蒙纳士大学 Siang-Piao Chai 教授在 *Chem. Soc. Rev.* 中将项目催化体系的性能作为同类光催化反应的典型参照（代表性引文 1）。

（三）国内外同行肯定了基于 AIMD 的动态反应路径解析方法，认为相关研究拓展了传统静态理论对复杂催化反应机制的认识

项目团队建立的基于 AIMD 的动态反应路径解析方法与演化规律，受到国际同行的广泛关注，并被用于进一步讨论光催化析氧反应机理：（1）中国科学院院士、第三世界科学院院士、英国皇家学会院士李灿教授在研究中讨论析氧反应中 *OH、*O 和 *OOH 等关键中间体的动态转化，并指出研究提供了“理解氧析

出中间体演化的重要依据”(附件 2-3-4);(2) 国家高层次人才、山东大学刘宏教授在 *Angew. Chem. Int. Ed.* 的研究中引用项目成果,指出“项目成果 DFT 理论计算,为分析 Fe_2O_3 基光阳极中不同组分在析氧反应机制中的作用”的重要作用(附件 2-3-5);(3) 国家级青年人才、钟俊教授在 *ACS Catal.* 中指出“项目团队识别了赤铁矿析氧过程中的关键反应中间体,并揭示了 O_2 脱附对整体反应动力学可能产生的重要影响”,同时认为这些机理认识“为赤铁矿基光阳极的理性设计提供了重要指导”(附件 2-3-6);(4) 阿联酋哈利法大学 Adnan Ozden 教授在 *Adv. Mater.* 中评述“该工作将 DFT 与 NEB、AIMD 及微观动力学等相结合的方法,将是未来估算真实反应势垒的重要方法”(附件 2-3-7)。

(四) 国内外同行关注项目在木质素选择性光催化转化方面的研究,将其作为理解复杂生物质转化机制和评价催化性能的重要参考

项目团队针对天然木质素结构复杂、C-C/C-O 键选择性活化困难等问题,发展的异质界面调控、自由基中间体调控及分子尺度反应路径设计等方法,得到国内外木质素催化转化领域同行的广泛引用和评价:(1) 加拿大国立科学研究院马东玲教授在 *Chem. Soc. Rev.* 中引用项目相关工作,并将其作为利用光催化方法活化和解聚木质素模型体系的研究案例进行讨论,认为“该工作为设计高效木质素活化和分解体系提供了新的思路”(代表性引文 5);(2) 国家高层次人才、加拿大工程院外籍院士、广东工业大学邱学青教授在 *Angew. Chem. Int. Ed.* 和 *Adv. Funct. Mater.* 研究中引用项目工作,并从光催化木质素解聚的角度指出“光催化体系能够在温和条件下提供可控驱动力并实现特定木质素连接键的选择性转化,为发展可控木质素解聚催化体系提供了重要参考”(代表性引文 2,附件 2-3-8);(3) 国家高层次人才、中国科学院大连化物所王峰研究员在 *Nature Commun.* 中将本项目工作作为木质素 β -O-4 结构一锅级联转化的典型案例(代表性引文 6);(4) 新加坡国立大学 Ning Yan 教授在 *J. Am. Chem. Soc.* 中引用本项目工作,将其作为木质素高值转化制备芳香化学品的代表性研究之一(代表性引文 7)。

此外,加拿大皇家科学院院士、加拿大工程院院士、中国工程院外籍院士张久俊教授(发表于 *Electrochem. Energy Rev.* 的综述,附件 2-3-9)、意大利林琴国家科学院院士 Gianfranco Pacchioni 教授(发表于 *ACS Catal.*, 附件 2-3-10)、澳大利亚科廷大学 Shaomin Liu 教授(发表于 *Angew. Chem. Int. Ed.*, 附件 2-3-11)、国家高层次人才、西北大学王建元教授(发表于 *Adv. Mater.*, 附件 2-3-12)、国家高层次人才、西安交通大学杨森教授(发表于 *Adv. Funct. Mater.*, 附件 2-3-13)、德国拜罗伊特大学有机化学系主任 Shoubhik Das 教授(发表于 *J. Am. Chem. Soc.*, 附件 2-3-14)等同行,均引用了项目成果。

综上,项目研究已形成从光催化材料与异质界面构筑、界面电子结构调控,到动态反应机制解析和天然生物质选择性转化的系列成果,相关研究得到国内外同行持续关注,为光催化材料理性设计、复杂催化反应机制解析及生物质资源高值利用提供了有价值的科学参考。

五、代表性论文专著目录

序号	论文专著 名称	刊名	作者	年卷页码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	发表 时间	通讯 作者	第 一 作者	国内 作者	他引 总次 数	检索数据 库	知识产权 是否归国 内所有
1	Hierarchical hollow zinc oxide nanocomposites derived from morphology-tunable coordination polymers for enhanced solar hydrogen production	Angewandte Chemie International Edition	Qi Zhu; Shuai Xu; Weidong Wu; Yi Qi; Zhan Lin; Yuliang Li; Yanlin Qin	2022 年 61 卷 e202205312 页	2022 年 05 月 06 日	Yuliang Li; Yanlin Qin	Qi Zhan; Shuai Xu	朱棋; 徐帅; 武卫东; 漆毅; 林展; 李宇亮; 秦延林	76	WOS	是
2	Efficient photocatalytic cleavage of lignin models by a soluble perylene diimide/carbon nitride S-scheme heterojunction	Angewandte Chemie International Edition	Xiaotong Xu; Shuqi Dai; Shuai Xu; Qi Zhu; Yuliang Li	2023 年 62 卷 e202309066 页	2023 年 09 月 07 日	Yuliang Li	Xiaotong Xu; Shuqi Dai	徐晓彤; 戴书琪; 徐帅; 朱棋; 李宇亮	111	WOS	是

3	One-pot catalytic cascade for the depolymerization of the lignin β -O-4 motif to non-phenolic dealkylated aromatics	Angewandte Chemie International Edition	Zhenlei Zhang; Ge Guo; Huaizhou Yang; Lina Csechala; Zhiwen Wang; Clemens Cziegler; Douwe S. Zijlstra; Ciaran W. Lahive; Xiangping Zhang; Uwe T. Bornscheuer; Peter J. Deuss	2024 年 63 卷 e20241038 2 页	2024 年 07 月 31 日	Xiangping Zhang; Zhenlei Zhang; Bornscheuer; Peter J. Deuss	张振磊; 郭歌; 杨怀舟; 王志文; 张香平	12	WOS	是
---	---	---	--	---------------------------	------------------	---	------------------------	----	-----	---

4	Toward superior capacitive energy storage: Recent advances in pore engineering for dense electrodes	Advanced Materials	Congcong Liu; Xiaojun Yan; Fei Hu; Guohua Gao; Guangming Wu; Xiaowei Yang	2018 年 30 卷 1705713 页	20 18 年 03 月 14 日	Gua ng min g Wu ; Xia owe i Yan g	Co ngc ong Liu	刘聪 聪; 闫 晓军; 胡飞; 高国 华; 吴 广明; 杨晓伟	272	WOS	是
5	Curing characteristics and performance of a bio-based polyurethane engineered sealant with high bonding strength: effect of R value and chain extender content	Constructi on and Building Materials	Xiaosong Liu; Zengping Zhang; Yu Luo; Jia Sun; Peijun Tian; Hao Liu; Zhiyong Mao; Shiyun Kan; Xinhe Yu	2024 年 432 卷 136684 页	20 24 年 05 月 20 日	Zen gpi ng Zha ng; Yu Luo	Xia oso ng Liu	刘晓 松; 张 增平; 罗钰; 孙佳; 田培 军; 刘 浩; 毛 志勇; 阚世 云; 余 新河	23	WOS	是
6											

7											
8											
合 计											

六、主要完成人情况

姓名	排名	行政职务	技术职称	工作单位	完成单位	对本项目贡献
李宇亮	1	副处	教授	长安大学	长安大学	全面负责本项目的总体设计、组织实施与协调管理，参与研究方案制定及关键科学问题讨论；作为代表性论文[1]、[2]、[4]的通讯作者
徐帅	2	无	讲师	长安大学	长安大学	主要负责催化材料的开发及相关机理验证，参与研究方案设计、实验实施和结果分析；作为代表性论文[1]的共同第一作者、论文[2]的参与者，参与了项目工作。
张香平	3	院长	教授	中国石油大学（北京）	中国石油大学（北京）	主要负责催化材料的开发、性能表征及相关机理验证，参与研究方案制定和实验结果分析；作为代表性论文[3]的共同通讯作者，参与了项目研究工作。
罗钰	4	无	高级工程师	长安大学	长安大学	主要负责催化材料的开发、性能表征及相关机理验证，参与研究方案制定和实验结果分析；作为代表性论文[5]的共同通讯作者，参与了项目研究工作。

						作。
杨晓伟	5	太原理工大学学术副校长	教授	同济大学	同济大学	主要负责催化材料的实验研究及机理验证，参与相关研究方案制定和实验结果分析；作为代表性论文[4]的共同通讯作者，参与项目研究工作的指导。
张振磊	6	无	副教授	中国石油大学（北京）	中国石油大学（北京）	主要负责催化材料的开发、性能表征及相关机理验证，参与研究方案实施和实验结果分析；作为代表性论文[3]的共同第一作者，参与了项目研究工作。

七、主要完成单位情况

完成单位	排名	对本项目主要贡献
长安大学	1	依托单位长安大学是该项目的第一完成单位，全面负责确定项目总体思路，统筹项目研发进度与协调参与单位资源等事宜，主要贡献为： （1）负责项目整体思路凝练与技术路线设计，组织制定可行的研究方案； （2）负责组织管理项目的进度，分配研究任务，协调参与单位间的资源使用； （3）提供良好的实验平台保障，发挥参与单位优势特色，组织进行成果客观评价。
中国石油大学（北京）	2	中国石油大学（北京）是该项目的主要参与单位之一，根据项目总体研究部署承担相关研究任务，主要贡献为： （1）针对项目研究涉及的关键科学问题，开展相关光催化反应及生物质资源高值转化研究，承担相应实验研究和技术验证工作； （2）发挥本单位在催化材料制备、反应过程调控及产物分析等方面的研究基础，完成相关实验研究与性能评价，为项目研究成果的可靠性和完整性提供支撑； （3）参与项目研究成果的分析、总结与评价，协同开展相关论文、专利及其他成果的形成，为项目总体目标的实现提供科研支撑。
同济大学	3	同济大学是该项目的主要参与单位之一，围绕项目总体研究目标承担了相关科学问题的研究与技术攻关，主要贡献为： （1）围绕项目核心科学问题，承担相关研究任务，开展光催化材料构筑、界面调控及反应机制研究，为项目关键科学问题的解决提供理论与实验依据； （2）依托本单位科研平台和技术优势，开展相关催化材料制备、性能评价及机理分析，完成项目承担的研究内容，为项目系列成果的形成提供重要支撑； （3）参与项目研究方案讨论、实验结果分析及成果总结，与项目其他完成单位开展协同研究，共同推动相关研究成果的形成与完善

八、完成人合作关系说明

本人作为项目第一完成人，对本项目完成人合作关系作如下说明。

本人与本项目第二完成人徐帅（长安大学）、第五完成人杨晓伟（同济大学）围绕光催化析氧反应关键中间体识别开展合作。本人主要负责研究工作的总体设计与组织协调，并指导从头算分子动力学研究；第二完成人徐帅主要负责反应路径追踪、动态模拟及相关结果分析；第五完成人杨晓伟主要负责界面电子结构演化规律的分析。本项目第三完成人张香平（中国石油大学（北京））和第六完成人张振磊（中国石油大学（北京））与本人自 2022 年起在多孔材料设计与碳资源循环领域开展合作，共同开展分子筛结构设计及聚乙烯升级回收研究。本人主要负责研究方案设计、催化界面电子调控策略及项目统筹；第三完成人张香平主要负责分子筛结构与合成方法开发；第六完成人张振磊主要负责催化性能评价及反应机理分析。本项目第四完成人罗钰（长安大学）自 2017 年起与本人围绕异质界面光催化材料开展合作。本人主要负责异质界面电子耦合机制的理论指导及研究方案设计，第四完成人罗钰主要负责多尺度界面材料的制备、表征及光催化性能测试。项目完成人之间长期保持科研合作关系，在光催化能源转化、环境污染治理及资源高值利用等方面共同开展研究，共同合著科研论文、申请知识产权及承担科研项目，具体合作情况见《完成人合作关系情况汇总表》。

本人作为项目第一完成人，对本项目完成人合作关系及上述内容的真实性负责，特此声明。

完成人合作关系情况汇总表

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作时间	合作成果	证明材料
1	论文合著	李宇亮，徐帅/1, 2	2018.01 - 2024.07	Hierarchical hollow zinc oxide nanocomposites derived from morphology-tunable coordination polymers for enhanced solar hydrogen production	代表性论文 1
2	论文合著	李宇亮, 徐帅, 杨晓伟/1, 2, 5	2018.01 - 2024.07	Identifying key intermediates for the oxygen evolution reaction on hematite using abinitio molecular dynamics	附件 2-2-6
3	论文合著	李宇亮, 张香平, 张振磊/1, 3, 6	2022.01 - 2024.07	iPDA-assisted design of hierarchical Beta zeolites for the sustainable upcycling of polyethylene to naphtha with ultra-low Pt loading	附件 2-2-1
4	共同知识产权	李宇亮, 罗钰/1, 4	2017.01 - 2024.07	一种芳烃烷基化催化剂及其应用	附件 2-4-1

5	共同立项	李宇亮, 罗钰/1, 4	2020.01 - 2021.12	基于草莓结构的 TiO ₂ @小球藻生物 吸附-光催化耦合效 应及应用	附件 2-5-1
---	------	--------------	-------------------------	---	----------