

金属与载体相互作用

基础研究奖

推荐专家：包信和、杨金龙、方维海、马丁、罗毅

1. 推荐意见

(1) 包信和（复旦大学）

金属与载体相互作用是多相催化的核心基础问题。该成果在三个方面取得突破：创立催化稳定性的 Sabatier principle，提出双功能载体设计概念，破解两类烧结通道难以兼顾的理论制约；建立金属与载体相互作用的物理方程和包覆判据，揭示界面成键本质；将相互作用调控推进到单原子前线轨道层面，实现活性与稳定性协同提高。三项成果贯通稳定性动力学、界面成键和电子结构，构成系统的物理化学理论框架。文章发表后，稳定性理论已被国内外同行用于抗烧结材料筛选及热、电催化剂设计，彰显出其重要学术影响。系列成果围绕同一基础问题持续深化，兼具物理内涵、理论原创性与可迁移的设计价值。我推荐申报 2026 年度中国科学院杰出科技成就奖基础研究奖。

(2) 杨金龙 (同济大学)

该项目围绕金属与载体相互作用的构效关系,取得系统性原创成果。揭示相互作用对颗粒迁移与原子熟化的相反影响,创立了稳定性的 Sabatier principle 及双功能载体设计准则;融合物理推导和可解释性人工智能,建立界面作用方程,提出强金属—金属作用包覆判据;阐明载体能级与单原子前线轨道耦合规律,将电子结构认识落实为活性与稳定性协同调控。三项成果在动力学、界面成键和电子结构层面相互贯通,建立微观作用与材料性能的定量联系。稳定性理论已获国际大量独立研究团队的设计采用,界面认识在后续机制研究中得到拓展,丰富了理论化学与多相催化基础理论。我推荐申报 2026 年度中国科学院杰出科技成就奖基础研究奖。

(3) 方维海 (北京师范大学)

该成果立足物理化学,围绕金属与载体相互作用,将理论方法创新与基本规律发现紧密结合。建立统一烧结动力学框架和稳定性 Sabatier principle,提出双功能载体设计概念;融合实验数据、可解释性人工智能与近邻成键模型推导,建立界面作用物理方程,揭示成键本质和包覆机制;阐明单原子界面的前线轨道耦合规律,建立载体能级与催化性能的定量关联。系列成果从复杂现象中提炼可计算、可检验的物理规律,形成由稳定性理论到成键机制和电子调控的系统认识,其稳定性理论被用于材料设计,对金属与载体相互作用理论及理论化学方法发展具有重要意义。我推荐申报 2026 年度中国科学院杰出科技成就奖基础研究奖。

(4) 马丁（北京大学）

该成果针对金属与载体相互作用中稳定锚定、包覆形成和催化活性协同调控的关键科学问题，取得系列原创突破。提出催化剂稳定性 Sabatier principle 和双功能载体设计概念，为抗烧结催化剂构筑提供理论准则；建立界面作用物理方程及包覆判据，阐明金属与载体的成键本质；通过前线轨道匹配实现单原子活性与稳定性协同提高。三项成果紧扣同一科学主线，将微观作用机制转化为催化剂设计依据。国外团队已据稳定性理论开展氧化物载体筛选、耐烧结热催化剂及耐久电催化剂设计，体现出跨体系的科学价值，由理论认识推进到实际构筑，是对多相催化基础理论的重要贡献。我推荐申报 2026 年度中国科学院杰出科技成就奖基础研究奖。

(5) 罗毅（中国科学技术大学）

该成果围绕金属与载体相互作用，形成物理理论与可解释性人工智能相结合的鲜明特色。从海量表达式中发现界面作用方程，并通过成键模型推导和第一性原理计算阐明物理内涵，提出包覆判据；建立两类烧结通道竞争的稳定性 Sabatier principle 及双功能载体设计准则；发展单原子前线轨道调控理论，实现活性与稳定性协同提高。系列成果将数据规律凝练为物理方程，将动力学、成键和电子结构认识贯通为系统的理论框架。稳定性准则已被独立团队用于材料筛选和实验设计，显示出基础规律发现对材料设计的实际指导价值，体现了数据驱动与物理推导相互印证的研究特色。我推荐申报 2026 年度中国科学院杰出科技成就奖基础研究奖。

2. 代表性论文专著列表、其他知识产权和标准等列表

代表性论文专著列表

序号	论文题目	刊名	年卷页码	全部作者 (*为通讯作者)
1	Sabatier principle of metal-support interaction for design of ultrastable metal nanocatalysts	Science	2021, 374, 1360–1365	Sulei Hu; Wei-Xue Li*
2	Nature of metal-support interaction for metal catalysts on oxide supports	Science	2024, 386, 915–920	T. R. Wang; J. Y. Hu; R. H. Ouyang; Y. T. Wang; Y. Huang; Sulei Hu; Wei-Xue Li*
3	Metal-support frontier orbital interactions in single-atom catalysis	Nature	2025, 640, 668–675	Xianxian Shi; Zhilin Wen; Qingqing Gu; Long Jiao; Hai-Long Jiang; Haifeng Lv; Hengwei Wang; Jiani Ding; Mason P. Lyons; Alvin Chang; Zhenxing Feng; Si Chen; Yue Lin; Xiaoyan Xu; Pengfei Du; Wenlong Xu; Mei Sun; Yin Li; Bing Yang*; Tao Zhang; Xiaojun Wu*; Junling Lu*
4	Synergizing metal-support interactions and spatial confinement boosts dynamics of atomic nickel for hydrogenations	Nature Nanotechnology	2021, 16, 1141–1149	Jian Gu; Minzhen Jian; Li Huang; Zhihu Sun; Aowen Li; Yang Pan; Jiuzhong Yang; Wu Wen; Wu Zhou; Yue Lin; Hui-Juan Wang; Xinyu Liu; Leilei Wang; Xianxian Shi; Xiaohui Huang; Lina Cao; Si Chen; Xusheng Zheng; Haibin Pan; Junfa Zhu; Shiqiang Wei*; Wei-Xue Li*; Junling Lu*
5	Orchestrating structure and chemistry dynamics for cluster catalysis	National Science Review	2026, 13, nwag072	Jia-Lan Chen; Hong-Yue Wang; Chuan-Liang Ruan; Jin-Xun Liu*; Wei-Xue Li*

其他知识产权和标准等列表

序号	类型	名称	著录信息	全部完成人
1	论文	Strong Metal–Metal Interaction-Induced Encapsulation of Cobalt by Lanthanum Nitride for Efficient Ammonia Synthesis	J. Am. Chem. Soc. 2026, 148(12), 13347–13357	Jie Luo; Junyi Yang; Chuwei Zhu; Yi Huang; Jin-Xun Liu; Wei-Xue Li*
2	专利	一种材料性能分析以及系统预测方法	ZL20251124366 7.9	李微雪;刘进勋;陈伽蓝;齐鑫泽
3	软著	工况多相团簇活性位点软件	2026SR0712246	李微雪;刘进勋;陈伽蓝
4	软著	工况催化表面与亚表面动态重构模拟软件	2026SR0602121	李微雪;刘进勋;王泓月
5	软著	多相团簇催化结构与化学动态调控软件	2026SR0599833	李微雪;刘进勋;陈伽蓝

3. 成员贡献情况

排序	姓名	工作单位	主要贡献
1	李微雪	中国科学技术大学	主导金属与载体相互作用理论研究，创立催化稳定性的 Sabatier principle，提出双功能载体设计；揭示界面成键本质，建立金属—氧化物界面作用方程及包覆判据，为高效稳定催化剂理性设计奠定理论基础。

排序	姓名	工作单位	主要贡献
2	路军岭	中国科学技术大学	发展单原子金属与载体相互作用的精准调控方法，通过实验揭示前线轨道调控活性与稳定性的规律；与李微雪合作，阐明界面作用与空间限域协同提高催化活性和选择性的机制。
3	刘进勋	中国科学技术大学	与李微雪共同构建结构与反应动态耦合的理论框架，参与建立结构重排与化学过程的相对时间尺度判据，为认识金属与载体相互作用的动态构效关系提供理论依据。