**一、成果基本信息**

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **序号** | **成果名称** | **主要完成人** | **主要完成单位** | **奖种** | **提名者** | **拟提名等级** |
| 1 | 低维材料的原子级精度构筑及磁光调控机理 | 袁宏宽、王广钊、陈洪、匡安龙 | 西南大学、长江师范学院 | 自然科学奖 | 重庆市北碚区人民政府 | 二等奖 |

**二、项目简介**

原子级制造技术作为战略科技力量，开创精准调控物质本征特性的颠覆性创新范式，突破传统制造精度极限，重构产业技术体系，成为引领高端装备智造与量子器件革命的基石性支撑。本项目聚焦团簇和二维异质结等低维材料的原子精度设计与物性调控，取得如下创新性成果：（1）从原子级水平探明过渡金属团簇的结构演化和磁性调控规律；（2）从原子级水平探索团簇与分子的相互作用，构建基于密度泛函理论的多体耦合模型，阐明团簇量子尺寸效应与分子轨道重组的协同机制；（3）从原子级水平探索磁光协同调控机制，实现高效可见光催化。

该成果形成了高水平论文集群，20 篇主要论文被SCI他引1000余次。研究成果获国际权威认可，被Chem. Rev.、Phys. Rev. Lett.、Adv. Mater.等顶级期刊专题评述，获得众多国内外权威专家的高度评价。

**三、代表性论文、专著目录(不超过5篇)**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 论文、专著名称/刊名/作者 | 影响因子 | 年卷页码（xx 年xx卷-xx 页） | 发表时间年 月 日 | 是否国内完成 | 通讯作者 | 第一作者 | SCI 他引次数 | 他引总次数 |
| 1 | The spin and orbital moment of Fen (n=2-20) clusters/The Journal of Chemical Physics/H. K. Yuan, H. Chen, A. L. Kuang, C. L. Tian, J. Z. Wang |  | 2013年139卷034314页 | 2013年7月21日 | 是 | 陈洪 | 袁宏宽 |  |  |
| 2 | Structural and Magnetic Properties of Small 4d Transition Metal Clusters: Role of Spin−Orbit Coupling/ Journal of Physical Chemistry A/ H. K. Yuan, H. Chen., A. L. Kuang, B. Wu, J. Z. Wang  |  | 2012年116卷11673-11684页 | 2012年11月29日 | 是 | 陈洪 | 袁宏宽 |  |  |
| 3 | Transition metal doped ZnO nanoparticles with enhanced photocatalytic and antibacterial performances: Experimental and DFT studies/ Ceramics International/ Kezhen Qi, Xiaohang Xing, Amir Zada, Mengyu Li, Qing Wang, Shuyuan Liu, Huaxiang Lin, Guangzhao Wang |  | 2020年46卷1494-1502页 | 2020年2月1日 | 是 | 刘书源、林华香、王广钊 | 戚克振 |  |  |
| 4 | High-capacity hydrogen storage in Li-decorated (AlN)n (n=12, 24, 36) nanocages/ International Journal of Hydrogen/ Guangzhao Wang, Hongkuan Yuan, Anlong Kuang, Wenfeng Hu, Guolin Zhang, Hong Chen |  | 2014年39卷3780-3789页 | 2014年3月6日 | 是 | 袁宏宽、陈洪 | 王广钊 |  |  |
| 5 | Double-hole-mediated codoping on KNbO3 for visible light photocatalysis/ Inorganic Chemistry/ Guangzhao Wang, Yuhong Huang, Anlong Kuang, Hongkuan Yuan, Yang Li, Hong Chen |  | 2016年55卷9620-9631页 | 2016年10月3日 | 是 | 陈洪 | 王广钊 |  |  |
| 合计 |  |  |