

## 2021 年度湖北省自然科学奖提名公示信息

项目名称、提名者及提名意见、项目简介、代表性论文专著目录、主要完成人（完成单位）

项目名称	离子液体双电层微观结构与形成机理研究
提各单位	华中科技大学
提名意见	<p>相比常用的水或有机溶液电解质，离子液体具有极低的挥发性，不可燃、不爆炸等优点，特别是其熔点更低、工作电压更高（4-6 V），已成为超级电容器、场效应管、电润湿等领域中备受关注的新型绿色电解质。而在这些领域中，理解离子液体与电极形成的双电层的微观结构及其形成机理，对设计高性能器件至关重要。尽管已经有大量的研究工作报道了离子液体在这些方向的应用和基础研究，但这些工作主要集中于其具体的应用和器件性能的宏观测量——主要因为研究仅具有纳米尺度的双电层在实验方法上费用高、耗时长、困难大。</p> <p>该项目设计了原位扫描隧道显微镜等微观表征技术，揭示了离子液体的离子（尺寸在 1 纳米左右）在金电极上的吸附结构，并被其开发的等电势分子动力学模拟所证实。根据离子液体的吸水性，研究了尺寸更小的水分子（约 0.35 纳米）在离子液体双电层中的分布规律，及其对离子液体高工作电压的影响与作用机制。实验和模拟的首创性都得到了业内学者的肯定，这为研究离子液体双电层提供了一个新的可行的途径，而双电层的微观结构与形成机理，有着重要的科学意义，对以双电层为核心的储能、门控、电润湿器件，有着重要指导价值，对离子液体电解质的应用于设计，同样有着重要引领作用；同时，对能源、物理、材料和化学等学科交叉也有一定的推动作用。此外，项目开发的实验和模拟技术也为研究双电层提供了新的研究手段，以供在分子层面上来揭示固液界面的结构细节。</p> <p>提名该项目为 2021 年度湖北省自然科学奖 1 等奖</p>
项目简介	<p>项目利用扫描隧道显微镜技术，揭示了离子液体在电极上形成的离子吸附结构；开发等电势分子动力学模拟技术，模拟再现了实验揭示的离子吸附结构，并展现了离子液体-电极双电层的微观结构及其与电压的依赖关系；进一步，研究了界面离子液体中含水的分布及其对含水离子液体工作电压的影响与作用机制。这些研究从分子层面上，展现了离子液体双电层的微观结构，并解释了其形成机理；研究工作对理解离子液体超级电容器的储能机理、离子液体场效应管的门控机理和离子液体电润湿的工作机制有着重要的科学意义。研究结果的被国际学者认为是在实验和模拟领域内关于界面离子液体的“首个”工作。</p>
主要完成人 (完成单位)	冯光（华中科技大学），颜佳伟（厦门大学），李会巧（华中科技大学），毛秉伟（厦门大学），翟天佑（华中科技大学）

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	发表时间（年月日）	通讯作者（含共同）	第一作者（含共同）	国内作者
1	Minimizing the electrosorption of water from humid ionic liquids on electrodes, Nature Communications; Sheng Bi, Runxi Wang, Shuai Liu, Jiawei Yan, Bingwei Mao, Alexei A. Kornyshev and Guang Feng	2018, 9, 5222	2018.12.04	Guang Feng, Jiawei Yan, Alexei A. Kornyshev	Sheng Bi	Sheng Bi, Runxi Wang, Shuai Liu, Jiawei Yan, Bingwei Mao, Guang Feng
2	Molecular Dynamics Study of Room Temperature Ionic Liquids with Water at Mica Surface; Green Energy & Environment(国内科技期刊); Huanhuan Zhang, Mengyang Zhu, Zhao Wei, Song Li, Guang Feng	2018, 3, 120-128	2017.12.06	Guang Feng	Huanhuan Zhang	Huanhuan Zhang, Mengyang Zhu, Zhao Wei, Song Li, Guang Feng
3	Scalable production of self-supported WS <sub>2</sub> /CNFs by electrospinning as the anode for high-performance lithium-ion batteries; Science Bulletin (国内科技期刊); Shasha Zhou, Junnian Chen, Lin Gan, Qing Zhang, Zhi Zheng, Huiqiao Li, Tianyou Zhai	2016, 61, 227-235	2016.01.25	Huiqiao Li, Tianyou Zhai	Shasha Zhou	Shasha Zhou, Junnian Chen, Lin Gan, Qing Zhang, Zhi Zheng, Huiqiao Li, Tianyou Zhai
4	Water in Ionic Liquids at Electrified Interfaces: The Anatomy of Electrosorption; ACS Nano; Guang Feng, Xikai Jiang, Rui Qiao, and Alexei A. Kornyshev	2014, 8, 11685-11694	2014.10.23	Guang Feng, Rui Qiao, Alexei A. Kornyshev	Guang Feng	Guang Feng
5	Double Layer of Au(100)/Ionic Liquid Interface and Its Stability in Imidazolium-Based Ionic Liquids; Angewandte Chemie; Yu-Zhuan Su, Yong-Chun Fu, Jia-Wei Yan, Zhao-Bin Chen, and Bing-Wei Mao	2009, 121, 5250-5253	2009.06.25	Bing-Wei Mao	Yu-Zhuan Su	Yu-Zhuan Su, Yong-Chun Fu, Jia-Wei Yan, Zhao-Bin Chen, and Bing-Wei Mao