

2025 年度重庆市自然科学奖提名公示

一、项目名称

低维材料原子制造的理论基础与磁光功能跨尺度调控

二、提名单位

重庆市北碚区人民政府

三、提名等级

提名该项目申报重庆市自然科学奖二等奖

四、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）从原子级水平揭示“原子/缺陷-电子结构-宏观性能”之间的内在关联，构建跨尺度耦合理论模型，阐明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，实现高效催化储能。

五、5篇代表性论文目录

主要论文清单		
序号	论文题目	刊物名称
1.	The spin and orbital moment of Fen (n=2-20) clusters	Journal of Chemical Physics
2.	Geometrical structure and spin order of Gd13 cluster	Journal of Chemical Physics
3.	Transition metal doped ZnO nanoparticles with enhanced photocatalytic and antibacterial performances: Experimental and DFT studies	Ceramics International
4.	Energy storage performances of La doped SrBi5Ti4FeO18 films	Chemical Engineering Journal
5.	Type-II CdS/PtSSe heterostructures used as highly efficient water-splitting photocatalysts	Applied Surface Science

六、主要完成人

袁宏宽、王广钊、陈洪、赵世峰、匡安龙

七、主要完成单位

西南大学、长江师范学院、内蒙古大学