中国科学: 化学 2026 年 第 56 卷 第 9 期: 2924 ~ 2947
SCIENTIA SINICA Chimica chemcn.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

评 述

从科学论文到技术专利: 单原子电催化剂研发进展

黄骥[1,2*], 靳文婷[3], 廖满生[4], 魏子栋[5*]

1. 西南政法大学知识产权研究院, 民商法学院(知识产权学院), 重庆 401120
2. 国家知识产权战略实施(西南政法大学)研究基地; 重庆知识产权保护协同创新中心, 重庆 401120
3. 西南政法大学国家安全学院, 重庆 401120
4. 深圳大学化学与环境工程学院, 物理与光电工程学院, 深圳 518060
5. 重庆大学化学化工学院, 重庆 401331
*通讯作者, E-mail: huangji@swupl.edu.cn; zdwei@cqu.edu.cn

收稿日期: 2026-03-21; 接受日期: 2026-04-15; 网络版发表日期: 2026-05-25
国家自然科学基金(编号: 52021004)资助项目

摘要 单原子催化剂因其极高的原子利用率与优良的催化性能, 成为催化科学尤其是电催化领域的前沿热点. 单原子固有的高表面能使单原子电催化剂在制备与反应过程中易发生迁移团聚, 导致活性下降, 这既是科学研究的关键难题, 也是技术开发的主要障碍, 研发兼具高活性、高稳定性、规模化可行性的催化剂具有重要意义. 本文在文献评述基础上融入文献计量分析, 以科学到技术的知识流动为重要视角, 综合分析科学论文与技术专利文献, 梳理单原子电催化剂总体研发态势, 深度聚焦制备方法与载体材料的研发进展, 最后进行总结和展望, 并提出相关建议.

关键词 单原子电催化剂, 论文, 专利, 科学-技术关联, 制备方法, 载体材料

1 引言

能源的稳定供应与清洁转型关系到国家的高质量发展和高水平安全, 关乎人类社会的可持续发展. 当前, 构建以可再生能源为主体的新型能源体系已成为全球共识, 电解水制氢、二氧化碳还原及燃料电池等电化学能源转换与存储方面的科学技术是实现上述目标的关键力量[1,2], 其科学研究与技术开发(简称"研发")的重点在于高效、稳定且经济的电催化材料的创新. 传统贵金属催化剂虽具有优异的催化活性, 但存在储量稀缺、成本高昂、稳定性不足及原子利用率低等问题[3~5], 严重制约其大规模商业化应用. 因此, 如何在原子尺度上实现金属活性中心的充分利用, 并进一步提升其催化活性和选择性, 成为电催化领域的重要研发方向[6].

2011年, 张涛院士团队提出了"单原子催化"的概念, 其开创性成果表明, 分散于FeO_x载体上的Pt单原子催化剂(single-atom catalysts, SACs)对CO氧化表现出优异的催化活性、选择性和稳定性[7]. 自此, 催化研究步入全新的"单原子"时代. SACs是金属原子孤立分散在载体上的一类新型催化剂[8~10]. 相较于传统金属纳米催化剂, SACs可实现接近100%的原子利用效率, 其

引用格式: Huang J, Jin W, Liao M, Wei Z. From scientific papers to technology patents: research and development progress in single-atom electrocatalysts. *Sci Sin Chim*, 2026, 56: 2924–2947, doi: 10.1360/SSC-2026-0067

© 2026 《中国科学》杂志社

结构明确、高度均一的活性位点显著提升了催化反应的选择性[6,11~14], 在能源转换与存储等领域展现出广阔的应用前景. 然而, 单原子电催化剂的研发也面临突出的瓶颈与挑战. 一方面, 孤立的金属原子因具有极高的表面能, 在制备过程中极易发生迁移团聚, 形成低活性的纳米颗粒或团簇结构, 从而导致催化性能下降. 另一方面, 电催化通过调控电极电势(E)以指数形式($k\propto \exp[(1-\alpha)F(E-E^0)/RT]$)快速提升反应速率, 从而在常温常压下实现高效精准的反应控制, 避免了热催化高温环境导致的催化剂烧结与高能耗问题[15], 但这种强大的电势/电场调控能力也对SACs的稳定性构成严峻考验. 在强电场下, 电极界面处于持续的高能非平衡态, 易破坏其热力学稳定性. 双电层内极高的表面电荷密度会产生强静电作用[16], 并在中间体强烈吸附的协同作用下诱发单原子迁移, 导致团聚失活[17]. 此外, 电场驱动的快速电荷转移会引发单原子配位环境的动态重构, 也可能造成本征活性衰减与选择性下降. 这些因素共同导致单原子电催化剂在实现高活性的同时往往在长期稳定性、规模制备等方面遭遇挑战. 因此, 如何通过合理的结构设计与载体工程来构建兼具高催化活性、优异稳定性、规模化可行性的SACs, 已成为该领域的关键难题与核心课题.

当前, 单原子电催化剂的研发正处于从科学研究向产业实践过渡的关键时期, 世界各国的诸多创新主体在该领域开展竞争与合作, 从多个角度、多条路线进行探索攻关. 梳理该领域的研发进展有利于为研发路径的选择和研发难点的突破提供线索, 也有利于为研发成果的管理运营提供思路. 已有的科技文献评述通常以科学论文作为评述对象, 对技术专利的关注相对薄弱[18,19]. 在单原子电催化剂领域, 单纯以论文为分析对象的评述虽然能够较好地揭示催化机理和构效关系, 但难以充分反映产业导向型的技术开发进展以及科学对技术的影响情况. 在对科学论文进行评述的基础上融入专利信息分析, 能够较好地克服上述局限. 专利文献是全世界规模最大的科技资料库, 包含着众多无法通过其他途径获取的技术信息[20,21], 而且专利文献记载的内容主要属于产业导向型技术, 能够与侧重于基础科学研究的论文文献形成良好互补关系. 综合分析科学论文与技术专利文献已成为全面深入考察国家科技实力以及特定领域研发进展的重要方式[22,23]. 通过分析专利对论文的引用情况、论文及专利产出主体的重合情况, 还可以较好地评测“科学-技术关联”态势, 尤其是科学研究对技术开发的影响[24~26]. 因此, 本文在文献评述基础上融入文献计量分析, 以科学到技术的知识流动为重要视角, 通过对科学论文文献、技术专利文献的综合分析来评述单原子电催化剂的研发进展. 首先从研发成果数量、研发成果来源国、关键研发主体的角度分析单原子电催化剂的总体研发态势; 然后分别聚焦制备方法、载体材料, 依据论文内容梳理科学研究的主要方向路径, 结合专利信息考察各方向路径的技术开发情况, 全面深入评判其研发进展; 最后进行总结和展望, 提出相关建议.

本文评述的论文文献检索自Web of Science核心合集SCI-E数据库, 检索日期是2025-11-26. 基于研读文献并咨询本领域专家, 采用(“single* atom* cataly*” or “atomical* cataly*” or “isolated* atom*”)与(electrocataly* or electrochem*)两组相关主题词, 检索在2011~2025年发表且标题、摘要或关键词中既包含单原子催化相关术语也包含电化学相关术语的论文. 为确保检索结果的准确性与相关性, 依据文献题目、作者及DOI号对检索结果去重后, 进一步对标题、摘要、关键词以及部分论文的正文内容进行人工复核, 剔除与本文主题不符的结果(如仅涉及传统纳米催化而非单原子催化, 以及聚焦光催化、热催化而非电催化的文献), 最终筛选获得6396篇论文文献. 专利文献检索自incoPat数据库, 检索日期是2025-11-26. 在采用上述两组主题词的基础上, 结合联合专利分类(cooperative patent classification, CPC)进行检索, 限定范围为2011~2025年申请且满足以下条件的发明专利: 标题、摘要或权利要求书中包含单原子催化相关术语, 且说明书中包含电化学相关术语或CPC分类属于电化学技术类别. 依据专利申请号合并相同结果, 对检索结果的标题、摘要、权利要求书以及部分专利的说明书内容进行人工复核, 剔除不符合本文研究主题的结果, 最终获得1003件发明专利文献.

2 单原子电催化剂总体研发态势

2.1 研发成果数量演变分析

图1反映了研发成果数量演变情况. 需说明的是,

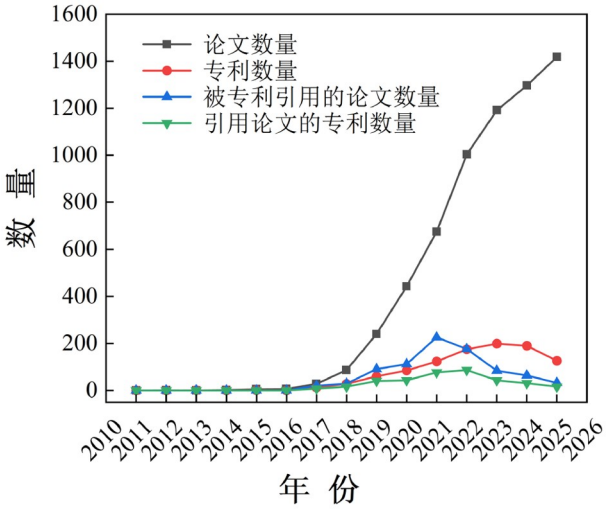


图 1 (网络版彩图)研发成果数量演变

Figure 1 (Color online) Evolution of the number of research and development (R&D) achievements.

大多数发明专利申请是在申请日起满18个月之时公开, 因此2024~2025年的部分专利申请在本文采集数据时尚未被数据库收录, 这是该阶段专利申请数量(简称“专利数量”)、引用论文的专利数量、被专利引用的论文数量出现下降的重要原因. 为排除以上因素的干扰, 本文重点考察2011~2023年的情况.

论文数量在2011~2016年期间处于较低水平, 每年皆未超过10篇; 在2017~2022年处于高速增长期; 2023年增速放缓, 进入平稳增长期. 专利数量在2016年之前仅为个位数, 在2017年有了明显增长, 此后直至2023年都处于平稳增长状态. 可见, 论文数量、专利数量总体上都在不断增长, 反映该领域吸引了越来越多的研发资源并持续取得研发进展. 论文的数量和增速显著高于专利, 说明该领域的科学研究处于主导引领地位, 技术开发处于从属跟随地位.

专利引用论文的情况是评测科学研究对技术开发的影响度的重要指标. 被专利引用的论文数量、引用论文的专利数量在2017年实现零的突破, 而后经历了数年的平稳增长期, 说明科学研究对技术开发的支持和启示不断增强. 但以上两项指标分别于2022年、2023年出现回落, 部分原因在于技术开发的基本理论路线趋于明晰, 参考论文的需求有所下降, 同时也说明最新的科学研究成果尚未被技术开发及时借鉴转化.

2.2 研发成果来源国分析

分析研发成果来源国情况有助于考察各国在单原子电催化剂领域的创新实力, 还可以从地理空间的维度反映科学研究对技术开发的影响. 本文依据专利申请人、论文作者的国别确定成果来源国, 一项成果涉及多国作者或申请人, 则同时归入这些国家.

首先考察各国的论文成果情况(图2a, b). 中国的论文数量(5343篇)位居首位, 美国(652篇)与澳大利亚(402篇)分别位列第二、第三, 随后依次为韩国(368篇)、新加坡(230篇)、印度(227篇)以及德国(209篇), 而英国、加拿大和日本的论文数量皆低于200篇; 从被各国专利引用的论文数量来看, 中国的论文数量最多(606篇), 美国位居第二(150篇), 其他国家的数量都低于50篇; 从被各国专利引用的论文数量在本国论文总量中的占比来看, 美国(23.0%)、日本(22.5%)处于“第一梯队”, 加拿大(17.0%)、英国(13.0%)、韩国(11.4%)、中国(11.3%)、德国(10.5%)、澳大利亚(9.5%)、新加坡(8.7%)处于中间水平, 印度的此项比例明显较低(4.0%). 可见, 美国、日本在该领域的科学研究成果对技术开发具有较强的启示性和推动力.

其次考察各国的专利成果情况(图2c, d). 中国的专利数量(804件)位居第一, 其后依次为韩国(102件)、美国(61件)、日本(23件); 从引用各国论文的专利数量来看, 中国的专利数量最多(298件), 其后依次为韩国(31件)、美国(17件)、日本(11件); 从引用各国论文的专利数量在本国专利总量中的占比来看, 从高到低依次为日本(47.8%)、中国(37.1%)、韩国(30.4%)、美国(27.9%). 可见, 日本、中国在该领域的技术开发对科学研究成果的吸收借鉴程度较高.

上述内容分析的是各国科学研究影响技术开发的总体程度, 在此基础上, 本文进一步借助桑基图(图3)呈现各国科学到技术的知识流动路径(知识输入来源地与知识输出目的地), 衡量各国科学研究影响技术开发的国际化或本土化程度. 图中的连线表示专利对论文的引用, 连线越粗表示引用次数越多. 无论是论文被各国专利引用的次数还是专利引用各国论文的次数, 中美两国都位居前二, 下文重点分析中美两国的情况.

中国论文被专利引用的次数中有85.7%属于被本国专利引用. 相较而言, 美国论文被专利引用的次数中

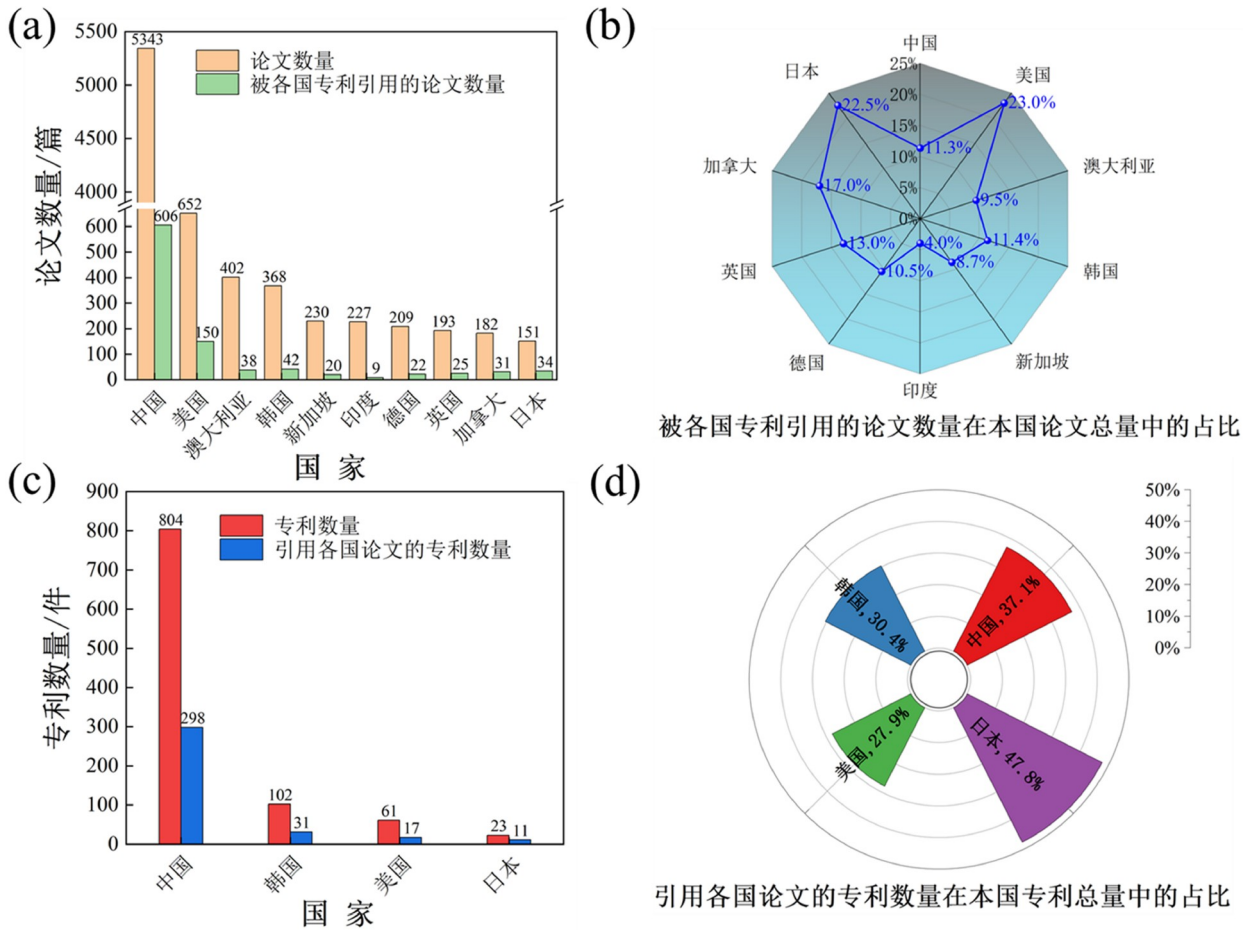


图 2　(网络版彩图) (a, b) 论文主要来源国的论文数量及其被各国专利引用的情况. (c, d) 专利主要来源国的专利数量及其引用各国论文的情况

Figure 2　(Color online) (a, b) Number of papers from major paper-producing countries and their citations by patents of various countries. (c, d) Number of patents from major patent-producing countries and their citations to papers of various countries.

仅有19.7%是被本国专利引用，绝大部分是被其他国家的专利引用，其中55.3%被中国专利引用，13.2%被德国专利引用，7.9%被韩国专利引用，说明美国在该领域的科学研究成果对其他国家的技术开发具有较强的启示性和推动力，对中国技术开发的影响尤为凸显. 中国专利引用论文的次数中，71.5%引用的是本国论文，11.5%引用的是美国论文，其余17.0%引用的是韩国、澳大利亚、日本、加拿大等国的论文. 美国专利引用论文的次数中，引用美国论文和中国论文的次数占比基本相同，都接近三分之一，其余34.1%引用的是澳大利亚、日本、加拿大、英国等国的论文. 可见, 美国在该领域的技术开发对其他国家科学研究成果的汲取和借鉴较多，而且将中国的科学研究成果作为汲取借鉴的关键对象.

通过以上分析可以发现，在单原子电催化剂领域，中国与美国既是最重要的成果产出国，也是科学到技术的知识流动最重要的参与国，而且中美两国之间存在显著的双向知识流动，既有激烈的竞争关系，也有重要的互惠关联. 相对而言，中国的知识流动路径本土化特征较强，而美国的知识流动路径国际化特征较强.

国际专利布局既是技术开发的重要环节，也可以反映研发成果的国际影响力和竞争力. 可先考察专利主要来源国(中国、韩国、美国、日本)的申请人在其主要专利布局目标的布局情况(图4a). 上述国家的申请人在本国之外的专利布局次数在其专利布局总次数

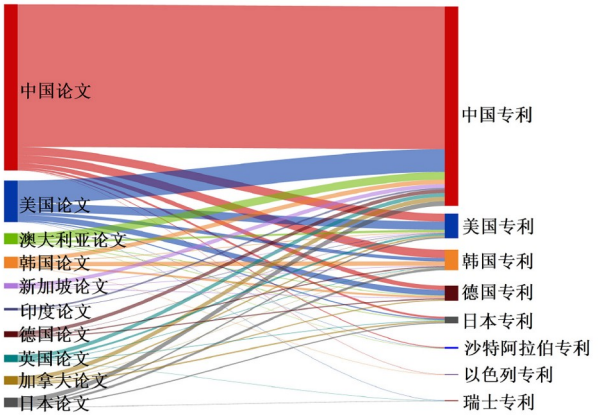


图 3 (网络版彩图)各国科学到技术的知识流动路径(知识输入来源地与知识输出目的地)

Figure 3 (Color online) Knowledge flow paths from science to technology in various countries (sources of knowledge input and destinations of knowledge output).

中的占比从高到低依次为日本(76.8%)、美国(66.4%)、韩国(60.5%)、中国(3.7%). 中国的此项比例明显低于其他三国, 部分因素在于中国主体在国内申请的专利数量较大, 但也反映出中国主体的海外专利布局充分度有待提升. 值得注意的是, 日本和美国主体均将中国作为其海外专利布局最重要的目标国, 可见两国主体高度重视在中国市场寻求技术控制权与竞争优势. 为进一步考察国际专利布局情况, 可以从"专利族"的角度进行分析. "专利族"通常表现为实质相同的技术方案在不同国家、地区、国际组织申请或授权的多项专利. 专利族的规模(单个专利族的成员数量)是反映国际专利布局充分度的重要指标. 如图4b所示, 中国99.4%的专利来自规模3件以下的"小家族", 比例明显高于其他国家, 说明中国大多数技术成果的专利布局范围限于本国或少数几个国家, 技术成果的国际影响力和竞争力可能受到制约. 日本将近三分之一的专利来自规模10件以上的"大家族", 比例明显高于其他国家, 反映日本主体的国际专利布局较为充分, 有利于通过跨国专利组合在全球市场获得较大的影响力和竞争力.

2.3 关键研发主体分析

分析单原子电催化剂领域的研发主体情况, 有助于识别研发成果的突出贡献者, 发掘研发合作网络. 考虑到当代研发活动与研发合作主要在机构的组织安排下开展, 本文将提交专利申请的机构和论文作者单位界定为"研发主体"; 将论文数量排名前三十的研发主体、专利数量排名前三十的研发主体分别界定为"科学研究关键主体""技术开发关键主体"; 通过联合发表论文、联合申请专利的频次来衡量研发主体之间的合作关系; 利用VOSviewer软件绘制科学研究关键主体之间的合作网络、技术开发关键主体之间的合作

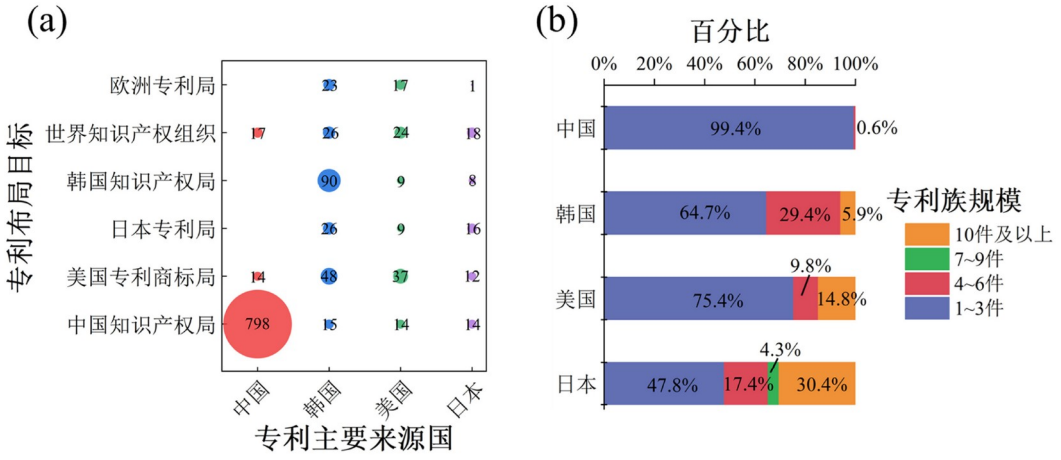


图 4 (网络版彩图) (a) 专利主要来源国的专利布局目标. (b) 专利主要来源国的专利族规模情况(注: 此处主要参考同族专利信息来分析主要来源国申请人的专利布局情况, 若一件专利有多件位于不同布局目标的同族专利, 则在每个布局目标项下分别计算布局次数)

Figure 4 (Color online) (a) Patent filing destinations of major patent-producing countries. (b) Patent family size of major patent-producing countries (Note: this section mainly refers to patent family information to analyze the filing destinations of applicants from major origin countries, where a patent corresponds to multiple family members in different destinations, each member is counted individually under each destination).

网络(图5). 图中节点大小代表论文或专利的产出规模, 连线粗细反映主体之间的合作强度. 如图所示, 无论科学研究成果还是技术开发成果, 都主要源于中国的机构, 而且都主要源于高校院所而非企业.

科学研究关键主体包括中国科学院、中国科学院大学、清华大学等中国机构以及美国能源部实验室、南洋理工大学、新加坡国立大学等其他国家的机构. 绝大多数主体都参与了合作研究. 中国科学院是科学研究成果最多的机构, 也是合作研究的枢纽, 不仅与大多数国内机构合作密切, 还与多家国外机构建立了较强的合作关系. 这表明自中国科学院大连化学物理研究所张涛院士团队提出“单原子催化”的原创概念以来, 中国科学院在该领域的科学研究中长期处于领军地位.

技术开发关键主体包括中国科学院大连化学物理研究所、中国科学技术大学、北京化工大学、浙江大学等中国机构以及韩国科学技术研究院、日本出光兴产株式会社、美国莱斯大学等其他国家的机构. 技术开发关键主体之间的合作十分稀疏, 跨国合作尤为少见, 这与科学研究关键主体之间的密集合作网络形成鲜明反差. 产业转化与市场合作是联合申请专利的常见动因, 技术开发关键主体的离散分布态势在一定程度上反映该领域的产业化仍处于初级阶段, 也说明国际市场存在广阔的“蓝海地带”.

结合图5与图6a所示数据, 本文筛选出在论文数量与专利数量排名中皆位列前30的主体(共15家), 将其界定为“复合型研发关键主体”(图6b). 如图所示, 此类主体均属于中国的高校院所, 说明中国高校院所在该领域具备科学研究和技术开发的双重优势, 在推动研发成果产业化方面具有重要潜力.

前文分析了单原子电催化剂的总体研发态势, 下文将聚焦其两大分支领域——制备方法与载体材料, 全面深入评判其研发进展.

3　单原子电催化剂制备方法的研发进展

3.1　制备方法的科学研究进展

为了实现孤立原子的有效稳定并抑制其团聚[27], 近十余年来, 研究人员已探索了多种多样的催化剂制备合成策略[28~34]. 这些策略的核心是在载体表面构筑稳固的锚定位点, 通过形成强金属-载体相互作用来克服原子迁移与团聚的热力学驱动力. 在众多合成路径中, 高温热解法、高能球磨法、快速焦耳热法、电化学沉积法、光化学合成法以及原子层沉积(atomic layer deposition, ALD)等已成为构建和稳定单原子活性中心的主要途径[35~40].

3.1.1　高温热解法

高温热解法是制备碳基SACs最主要的方法, 该方法通常在适宜的温度(600~1200℃)和气氛下, 对特定

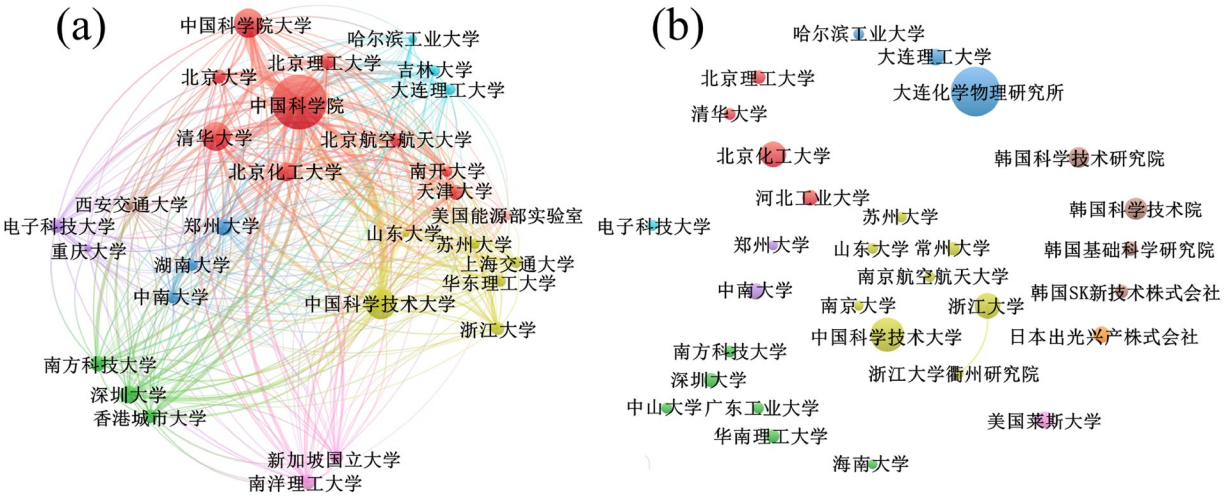


图 5　(网络版彩图) (a) 科学研究关键主体及其合作网络. (b) 技术开发关键主体及其合作网络

Figure 5　(Color online) (a) Key entities in scientific research and their cooperation networks. (b) Key entities in technological development and their cooperation networks.

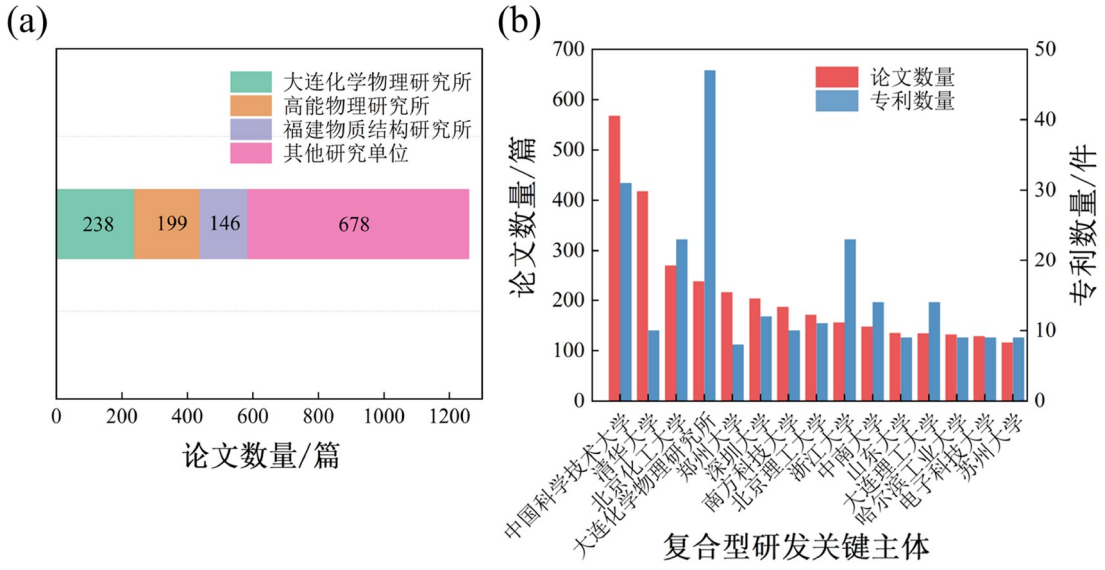


图 6 (网络版彩图) (a) 中国科学院各研究单位的论文数量. (b) 复合型研发关键主体的论文和专利数量

Figure 6 (Color online) (a) Number of papers from various research institutes of the Chinese Academy of Sciences. (b) Number of papers and patents of key integrated R&D entities.

前驱体进行热分解. 选择合适的前驱体, 不仅可以精准调控单原子位点的局部配位环境(如配位数、杂原子类型), 优化其电子结构, 还能有助于实现催化活性和选择性的“按需定制”[41]. 目前高温热解前驱体可以分为两类: 在碳骨架中引入杂原子, 创造更多锚定位点并利用其强配位作用稳定金属原子, 防止烧结聚集[42]; 以金属-有机框架结构(metal organic framework, MOF)作为前驱体, 借助其有序的孔道和丰富的配位位点, 在高温碳化后获取高密度、均匀分散的单原子活性中心[43,44]. Han等[45]采用通用的“溶解-碳化”法, 构建了包含37种单金属及多金属元素的SACs库, 揭示了局域配位环境与金属电负性的关联, 并利用原位技术阐明了金属中心由氧配位向氮/碳配位转变的动态机制(图7a, b). Chang等[46]发展的金属硫化物介导原子捕获策略, 利用超高氮掺杂碳基质, 通过金属硫化物纳米颗粒的热驱动分解与原子捕获, 实现了多种金属的超高负载(如Pt达33.4 wt%)及高熵SACs的制备(图7c, d). 此类方法也延伸至双原子催化剂(dual-atom catalysts, DACs)的制备. Zhang等[47]利用大环前驱体介导的封装-热解策略, 构建了同核与异核双金属单原子中心库, 其FeCu-DAC在酸性氧还原催化反应(oxygen reduction reaction, ORR)中经历10000次循环后半波电位仅衰减5 mV (图7e, f). 更进一步, Chen等[48]通过高温热解MOF及后配位策略合成了ZnCoFe异核三金属单原子催化剂(trimetallic-atom catalyst, TAC), 该催化剂(ZnCoFe-TAC/SNC)在锌-空气电池中展现出高功率密度和容量(图7g, h). 此外, 高温驱动迁移结合载体特异性捕获是制备非碳基SACs的常用有效策略[49,50]. 例如, Jones等[51]通过高温氧化处理使Pt纳米颗粒释放可迁移的PtO_2物种, 该物种扩散至CeO_2载体表面后, 被其特定晶面或氧空位捕获, 形成强的Pt–O–Ce键, 从而实现Pt单原子的稳定分散. 同样, Chen等[52]利用高温诱导Al_2O_3-La_2O_3界面发生重构, 产生阳离子空位, 此类空位通过限域效应有效捕获迁移的Pt原子, 进而形成稳定的Pt SACs.

总之, 高温热解法凭借其对载体结构(缺陷、杂原子掺杂)和金属位点配位环境的强大调控能力, 成为连接宏观制备与原子级结构调控、理性设计高性能SACs的最有力工具之一. 尽管面临高温下金属易团聚、位点结构难以精确预设计等挑战[53], 但通过不断创新的前驱体设计和过程调控, 该方法将继续推动单原子电催化剂领域的发展.

3.1.2 高能球磨法

球磨法作为一种有效的化学键切割与重建方法, 在SACs的直接合成或辅助合成方面受到广泛关

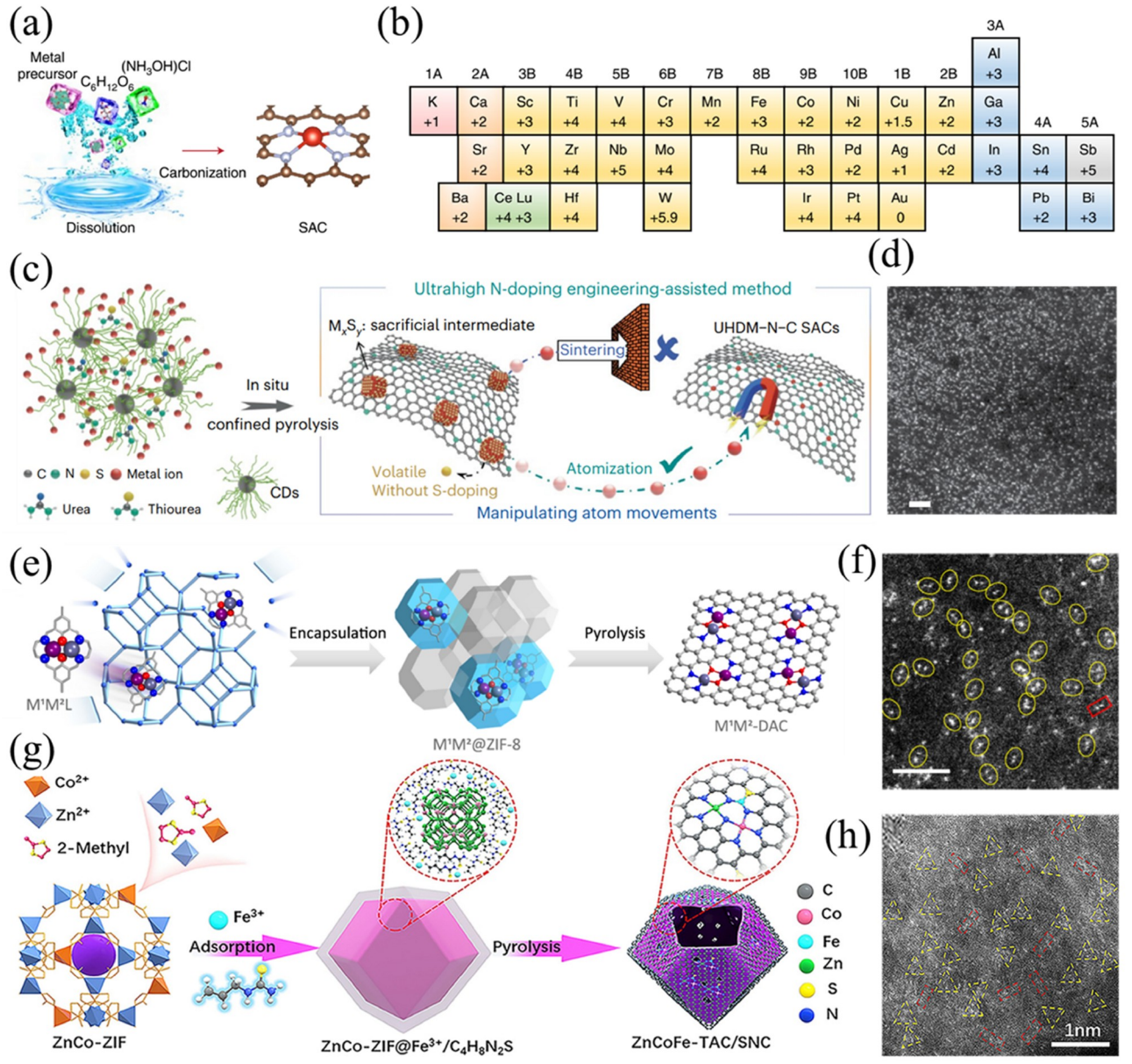


图 7　(网络版彩图) (a, b) SACs合成示意图和SACs中37种金属元素的平均价态[45]. (c, d) 超高氮掺杂工程辅助的高载量SACs合成示意图和对应方法制备的高载量Pt SACs表征结果. 比例尺为2 nm[46]. (e, f) 大环前驱体介导的封装-热解过程合成DACs示意图和FeCu-DAC的角环形暗场扫描透射电子显微镜(HAADF-STEM)图. 比例尺为2 nm[47]. (g, h) ZnCoFe-TAC/SNC的合成示意图和HAADF-STEM图[48]

Figure 7　(Color online) (a, b) Schematic illustration of SAC synthesis and average valence states of 37 metallic elements in SACs [45]. (c, d) Schematic of ultrahigh nitrogen-doping engineering-assisted synthesis for high-loading SACs and characterization results of the synthesized high-loading Pt single-atom catalyst. Scale bar, 2 nm [46]. (e, f) Schematic of DACs synthesis via a macrocyclic precursor-mediated encapsulation-pyrolysis process and high-angle annular dark-field scanning transmission electron microscopy (HAADF-STEM) image of FeCu-DAC. Scale bar, 2 nm [47]. (g, h) Schematic synthesis and HAADF-STEM image of ZnCoFe-TAC/SNC [48].

注[54,55]. 该方法借助磨球产生的剪切力、冲击力和局部高温破坏金属前驱体(如金属盐或块体金属)的化学键, 同时在载体(如氮掺杂碳、金属氧化物)表面原位构筑缺陷位点来捕获并稳定解离后的金属单原子[56,57]. 球磨法的工艺灵活(干法/湿法可选)、无需复杂设备、环境友好, 操作简便且无放大效应[58~60]. 例

如, Wang等[61]通过一种球磨诱导的金属表面原子剥离策略, 成功构建了具有Co-N_4-S构型的双位点SACs (Co-SNC) (图8), 该方法利用球磨过程中产生的机械力, 使钴块体表面的原子脱嵌, 并被硫、氮共掺杂的碳载体捕获, 实现了克级规模(单次产量超过4.7 g)的SACs制备. Wang等[62]开发了一种球磨多米诺反应策略, 用于规模化制备氮掺杂碳纳米片负载的镍SACs (Ni-SA/NC), 该催化剂在电催化CO_2还原反应中表现出优异的活性. 进一步的密度泛函理论(density functional theory, DFT)计算揭示, NiN_4位点中相邻的吡咯型氮可诱导电子从Ni的4s轨道向邻近N原子的2s轨道转移, 从而稳定COOH*中间体, 显著增强CO_2的电还原活性. 目前, 球磨法仍受限于金属分散效率低、制备周期长、易引入杂质等问题, 且大容量球磨机所采用的间歇操作模式难以实现连续化生产[63~65].

3.1.3 快速焦耳热法

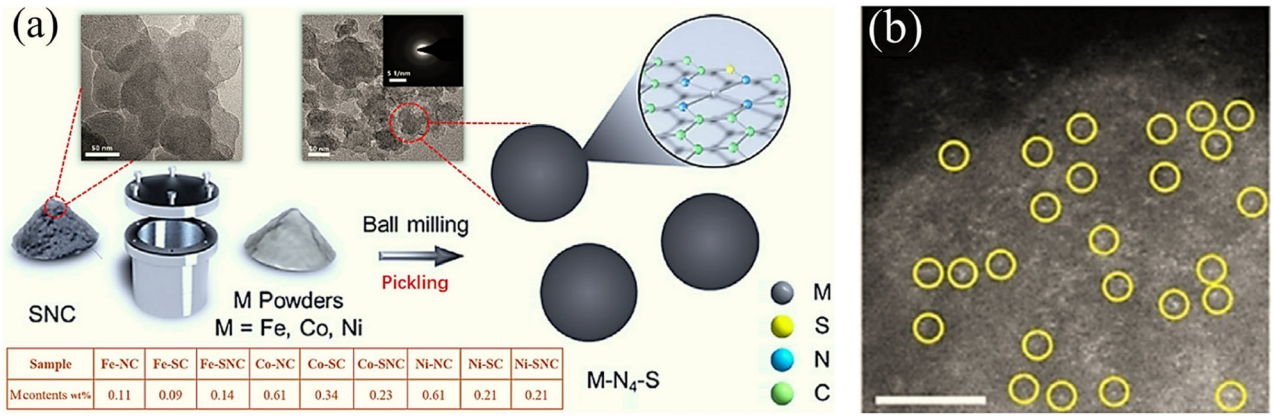
快速焦耳热法作为一种超快速、高效且可扩展的合成策略, 为制备适用于多种能量转换系统(如制氢、金属空气电池、燃料电池等)的高性能电催化剂提供了新方法. 这种方法依据焦耳定律($Q=I^2Rt$), 通过电容放电或直接通电在导电载体(如碳纳米管、石墨烯等)上产生瞬时高温场, 促使金属前驱体完全分解为原子态, 并利用超快淬冷过程抑制原子迁移和团聚, 在载体缺陷或杂原子(如N、O)锚定位点形成稳定的单原子分散结构[66,67]. Fei等[68]提出了一种基于焦耳加热触发的瞬态加热-淬火策略, 用于制备三维多孔结构的钴氮共掺杂石墨烯SACs (CoNG-JH). 该策略利用超快焦耳加热过程, 在2 s内同步实现氧化石墨烯的还原以及钴、氮原子的掺杂. 同时, 瞬态淬火避免了长时间加热导致的原子聚集, 确保了原子级CoN_x活性位点在石墨烯中快速且稳定的分散(图9). Liu等[69]采用快速焦耳热成功合成了Pt含量仅为2.3 at%的催化剂Pt_1-Ni-CoMgBiSn, 其质量活性高达35.3 A/mg, 该创新设计使单原子Pt位点既能激活C–O键, 又通过高熵配位环境削弱*CO吸附. 目前, 快速焦耳热法也已扩展至金属离子电池、超级电容器等电催化应用领域[70~72].

快速焦耳热法凭借其独特的“点对点”加热机制, 实现了对材料瞬时、均匀的内部加热, 有效避免了传统加热方式中因热传导与对流引起的能量损失. 同时, 该方法通过快速升温抑制了材料向热力学稳定相的转变. 此外, 该方法可以在室温下启动, 具有能耗低、适于规模化生产的优势[73,74]. 值得注意的是, 在采用快速焦耳热法的规模化制备过程中, 仍需解决若干关键问题, 包括因快速升温和冷却过程中难以避免的温度波动所导致的偏差, 以及瞬时高温引起的材料不均匀性对批次重复性造成的影响等.

3.1.4 电化学沉积法

电化学沉积法因无需苛刻的反应条件(如高温或高压)而被广泛应用于SACs的制备中. 该方法利用外加电场驱动溶液中的金属前驱体离子在电极表面发生氧化还原反应, 从而构建特定涂层或SACs[75,76]. 目前, 使用电化学沉积法制备SACs主要有两种方式: 一是通过对电压的精确控制, 使溶液中的目标金属离子在工作电极表面还原并沉积为金属单原子; 二是将对电极本身作为目标原子的来源, 通过特定的电化学过程促使原子在电极表面沉积[77~79]. 例如, Zhang等[80]通过调控电解液浓度与沉积圈数等关键参数, 采用阴极/阳极电化学沉积方法, 在多种基底上成功制备了30余种SACs, 研究结果表明, 阴极沉积获得的SACs在析氢反应(hydrogen evolution reaction, HER)中表现出优异的催化性能, 而阳极沉积制备的SACs则对析氧反应(oxygen evolution reaction, OER)具有较高活性(图10a, b). Zhang等[81]报道了一种通过电位循环电化学沉积策略在CoP基纳米管阵列/泡沫镍(Ni foam, NF)上制备铂SACs (PtSA-NT-NF)的方法(图10c, d). 该过程在磷酸盐缓冲溶液(PBS, pH 7.2)中进行, 以Pt箔为对电极兼Pt源, 通过在三电极体系中施加相对于饱和甘汞电极−1.5~−0.668 V的电位并进行5000次循环, 使Pt原子溶解并再沉积到CoP纳米管(NT)基底上, 形成原子级分散的Pt单原子. 所制备的PtSA-NT-NF催化剂在中性介质中展现卓越的HER活性和稳定性, 其质量活性是商业Pt/C催化剂的4倍. Wang等[82]利用离子液体的宽电化学窗口和可调黏度特性, 通过电化学沉积策略成功制备了20种单金属SACs及一种五金属SAC (图10e, f). 以Pt SACs为例, 在碳布支撑的氮化三镍/镍-钴-氧化石墨烯异质结构复合基底(Ni_3N/Ni-Co-GO@CC)上, 借助离子液体的温和环境实现了Pt的原子级分散, 该Pt SACs在碱性条件下表现出卓越的双功能催化活性.

总体而言, 电化学沉积法具有条件温和、操作简便、可控性强等优势, 有利于规模化制备高效的



Sample	Fe-NC	Fe-SC	Fe-SNC	Co-NC	Co-SC	Co-SNC	Ni-NC	Ni-SC	Ni-SNC
M contents wt%	0.11	0.09	0.14	0.61	0.34	0.23	0.61	0.21	0.21

图 8　(网络版彩图) (a) 球磨法制备SACs的示意图. (b) Co-SNC的HAADF-STEM图. 比例尺为2 nm[61]

Figure 8　(Color online) (a) Schematic illustration of the developed ball-milling approach for SACs. (b) HAADF-STEM image of Co-SNC. Scale bar, 2 nm [61].

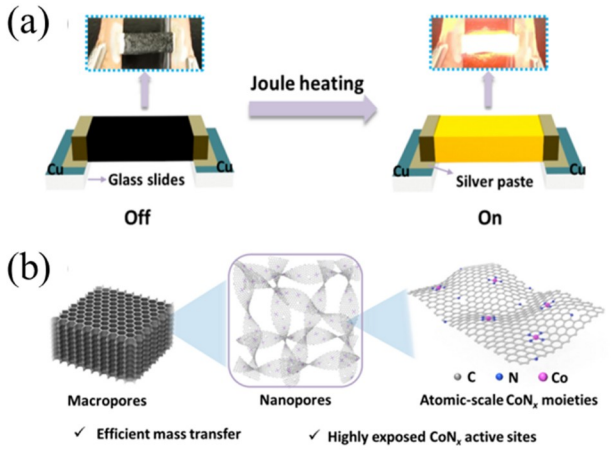


图 9　(网络版彩图) (a) 制备CoNG-JH催化剂的焦耳加热过程示意图. (b) 用于制氢的CoNG-JH电极设计策略[68]

Figure 9　(Color online) (a) Schematic of the Joule heating process for CoNG-JH catalyst synthesis. (b) Design strategy of the CoNG-JH electrode for hydrogen evolution [68].

SACs. 然而, 电化学沉积法仍面临若干挑战, 如电解质溶液可能引入杂质、金属单原子-载体相互作用不可控等问题. 因此, 在利用该方法制备SACs时, 精细化的实验设计与参数优化至关重要.

3.1.5　光化学合成法

光化学合成SACs是一种基于光诱导还原反应的先进制备策略, 可在载体表面实现金属物种的原子级分散与稳定锚定. 其核心机理在于利用紫外或可见光激发半导体载体(如TiO_2)产生电子-空穴对, 光生电子将金属前驱体还原为零价金属原子, 并借助载体表面的锚定位点(如缺陷、官能团等)形成强化学键固定原子, 抑制其迁移和团聚. 为克服单原子固有的高表面能, 研究者发展了冰辅助光化学法, 通过快速冷冻反应溶液形成冰晶网格, 物理隔离金属前驱体, 从而在光还原过程中阻断原子迁移和成核路径. 例如, Liu等[83]通过紫外光照射H_2PdCl_4溶液, 利用TiO_2表面乙二醇衍生的自由基协同作用, 成功制备了负载量为1.5 wt.%的Pd_1/TiO_2催化剂(图11a). Wei等[84]进一步拓展该方法, 在碳纳米管、TiO_2等多种载体上成功制备了Pt、Au、Ag等SACs, 并通过球差校正电子显微镜和X射线吸收谱证实了金属的原子级分散状态, 其Pt的载量可达2.6 wt.% (图11b). 此外, 另一种具有代表性的方法是激光法, 该方法基于脉冲红外激光(如1064 nm)的光热效应在载体表面产生高温(>2500℃), 再利用紫外激光(如355 nm)辐照还原金属前驱体, 生成原子态金属并借助载体表面的掺杂位点或缺陷位锚定单原子, 防止团聚, 最终形成原子级分散的SACs[85]. 该方法融合了光热与光诱导还原的双重作用, 能够实现高效、精准的单原子锚定.

尽管光化学合成法在电解水、ORR、CO_2还原等多种电催化方向展现出广泛应用潜力[86~89], 但在迈向实际应用过程中仍面临多重挑战: (1) 载体表面锚定位点数量有限, 制约了高密度单原子的有效负载. (2) 光能利用效率低, 多数半导体载体仅吸收紫外光, 且单原子修饰可能引入电荷复合中心, 降低电子利用

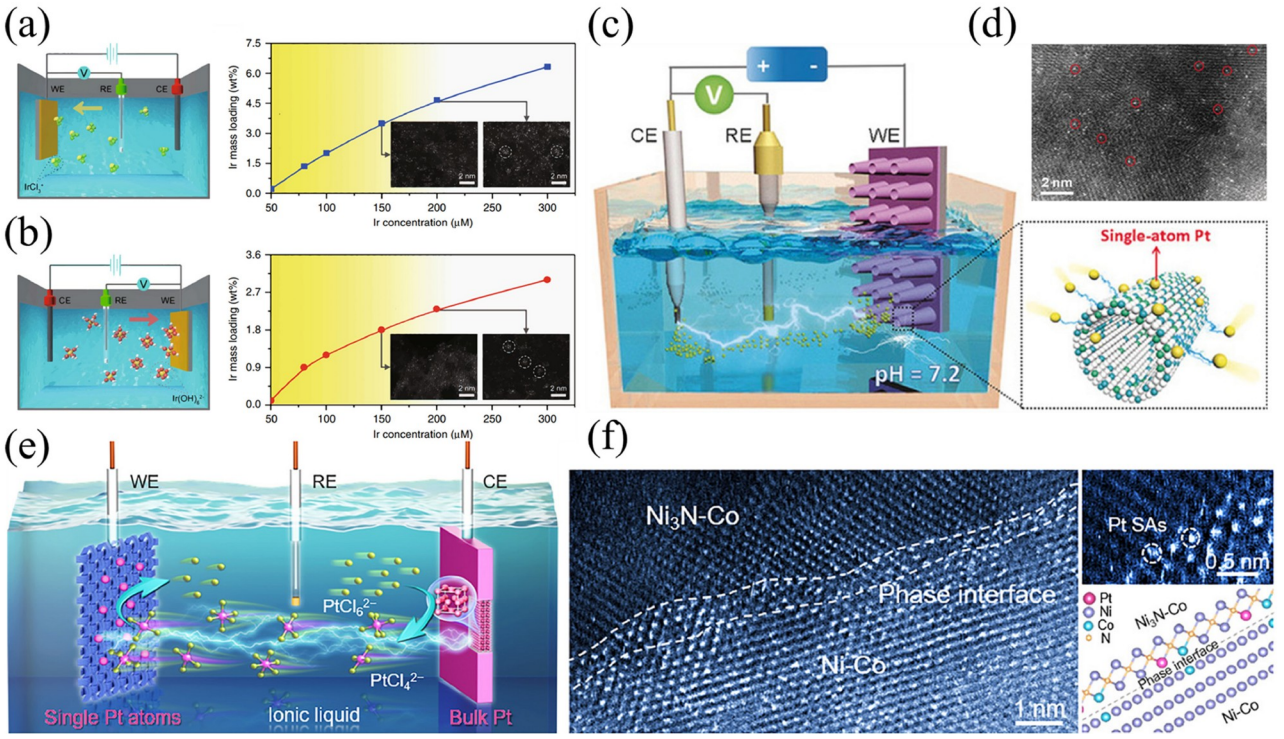


图 10 (网络版彩图) 三电极体系阴极(a)与阳极(b)沉积铱物种示意图. 1 M KOH中铱质量负载量与浓度关系: 阴极沉积(a)与阳极沉积(b), 插图展示单原子与团簇的HAADF-STEM图[80]. (c, d) Pt_{SA}-NT-NF合成示意图及铂单原子的HAADF-STEM图[81]. (e, f) 电解法合成SACs用于全解水的机理示意图与Pt_{SA}-Ni_3N/Ni-Co-GO异质结的HAADF-STEM图及模拟界面结构[82]

Figure 10 (Color online) Schematic of cathodic (a) and anodic (b) deposition of Ir species using a three-electrode system. Ir mass loadings vs. concentration in 1 M KOH for cathodic (a) and anodic (b) deposition, with HAADF-STEM images showing single-atoms and clusters [80]. (c, d) Schematic of Pt_{SA}-NT-NF synthesis and HAADF image of Pt atoms [81]. (e, f) Illustration of electrolytic synthesis mechanism for SACs in overall water splitting and HAADF-STEM images of Pt_{SA}-Ni_3N/Ni-Co-GO heterostructure with DFT-modeled interface [82].

率. (3) 光化学还原对光源参数敏感, 难以在放大制备中保持均一性. 这些挑战本质源于单原子热力学不稳定性与合成过程动力学控制难度的矛盾. 未来还需通过载体表面工程、原位表征技术及反应器等多方面的创新协同, 优化光化学合成路径, 克服工业化应用障碍.

3.1.6 原子层沉积法

原子层沉积法是一种将载体材料交替暴露于不同反应前驱体的脉冲蒸气中, 使物质以自限制的方式原子级地沉积在载体表面的薄膜沉积技术[90~94]. 以石墨烯负载Pt SACs的制备为例, 典型的ALD过程主要包括以下三个步骤(图12a~d): (1) 载体预处理. 石墨烯表面预先引入适量的缺陷或官能团(如含氧物种, O*)作为活性位点(图12a). (2) 暴露于金属前驱体. 在适宜温度下, 将气相金属前驱体(如甲基环戊二烯基三甲基铂、$MeCpPtMe_3$)脉冲通入反应室, 与载体表面官能团(如O*)反应生成吸附中间体(图12b). 此步骤为自限制反应, 每个活性位点仅结合一个前驱体分子. (3) 配体去除与活性位点再生. 通入共反应剂(如O_2)脉冲, 氧化去除残留的有机配体, 使Pt原子锚定在石墨烯表面, 同时再生表面的活性位点(如O*), 进行下一循环(图12d)[95~98]. 通过精确调控前驱体种类、反应温度以及循环次数, 可实现从单原子、团簇到纳米颗粒的可控制备(如图12c, e所示, 随着循环次数增加, Pt物种由单原子逐渐生长为纳米颗粒[98,99]). 此外, ALD借助有序沉积过程与空间限域策略, 还能进一步实现双金属或三金属SACs的精准构筑. 例如, Lu等[100]采用分步沉积策略在Pt_2/石墨烯体系中, 先通过$MeCpPtMe_3$和O_2在250℃下沉积孤立Pt单原子形成Pt_1位点, 再于150℃下进行第二轮ALD, 使第二个Pt原子选择性地锚定于已有Pt原子上, 形成稳定的Pt-Pt二聚体, 该过程依赖前驱

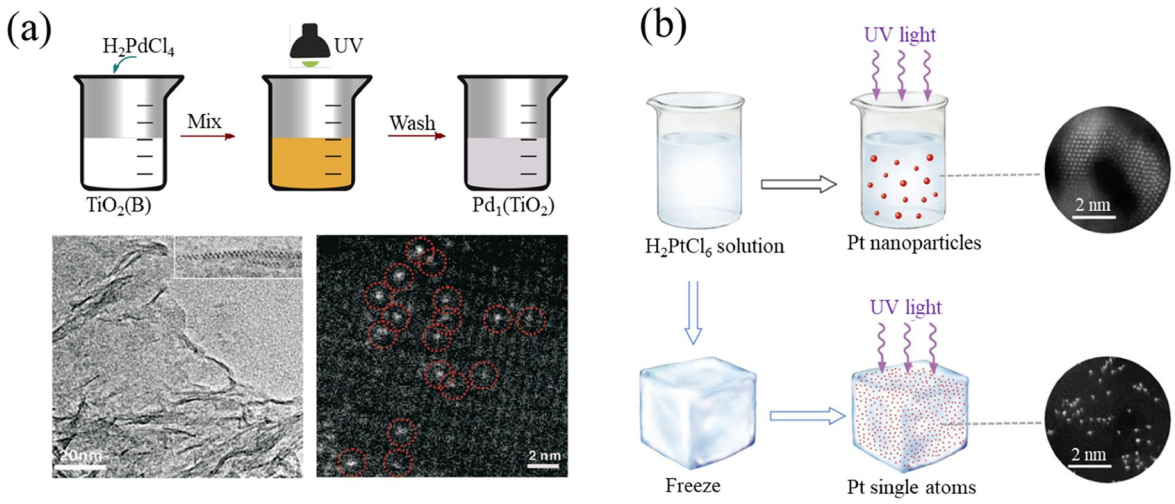


图 11　(网络版彩图) (a) Pd_1/TiO_2光合成示意图、TEM及HAADF-STEM图[83]. (b) 冰限域光化学法合成Pt单原子示意图[84]

Figure 11　(Color online) (a) Synthesis scheme, TEM, and HAADF-STEM images of Pd_1/TiO_2 [83]. (b) Schematic illustration of ice-confined photochemical synthesis of Pt single-atoms [84].

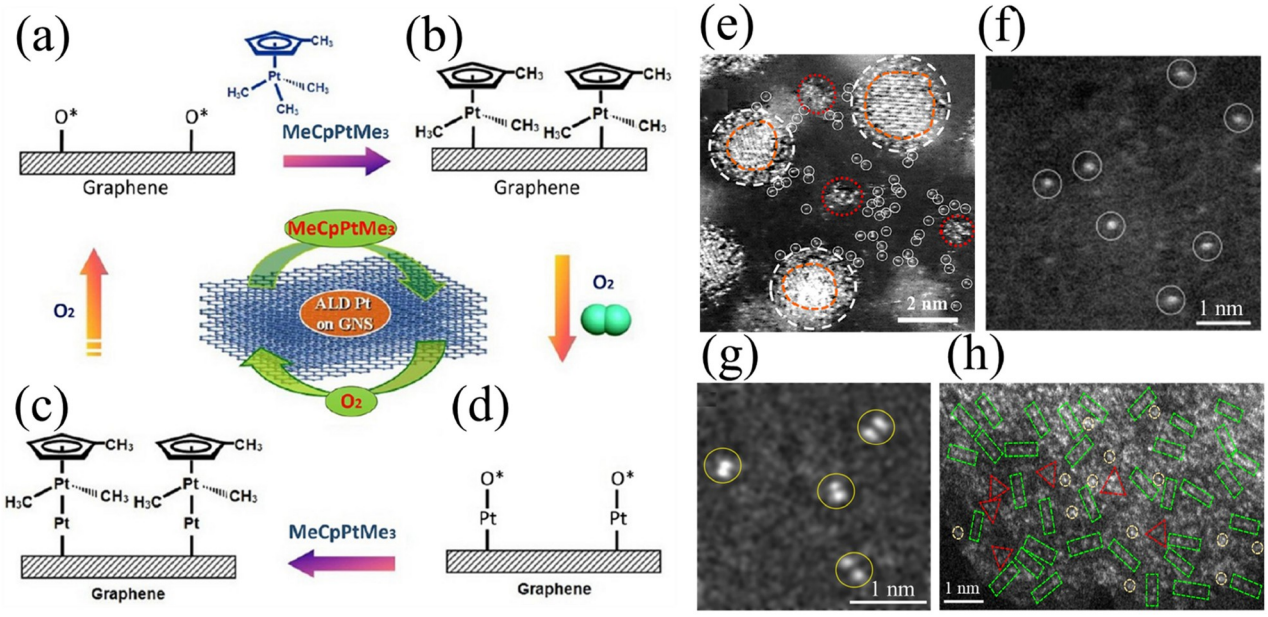


图 12　(网络版彩图) (a~d) ALD制备单原子Pt_1/石墨烯的示意图[98]. (e~h) $Pt_{SA+AC+NP*}$/CB[99]、Pt单原子、Pt二聚体[100]以及Cu-Ni-Cu三原子结构的HAADF-STEM图[101]

Figure 12　(Color online) (a–d) Schematic illustration of the synthesis of single-atom Pt_1/graphene by ALD [98]. (e–h) HAADF-STEM images of $Pt_{SA+AC+NP*}$/CB [99], Pt single-atom, Pt atom dimer [100], and Cu-Ni-Cu triatom [101].

体与已沉积原子的特异作用, 避免了随机成核(图12f, g). 此外, 他们借助空间限域与金属-载体协同作用构建了三原子结构: 先在石墨相氮化碳(graphitic carbon nitride, g-C_3N_4)的氮空位中沉积高密度Cu原子形成“原子夹钳”, 再利用NiO_x原子层沉积将Ni原子精准置于两个相邻Cu原子之间, 形成线性Cu-Ni-Cu结构(键长分别为2.74和3.10 Å), 其稳定性源于Ni与载体N的强相互作用及Cu夹钳的几何约束, 从而有效抑制了原子迁移与团聚(图12h)[101]. 尽管ALD技术目前仍面临工艺控制复杂、成本较高等挑战, 但其在未来SACs的精准设计

与制备中展现出巨大潜力, 有望通过原子级精度的可控合成推动高性能催化材料的开发, 在能源催化、电子器件等高端领域实现更广泛的工业应用.

3.2 制备方法的技术开发进展

前文通过梳理论文成果呈现了单原子电催化剂各类制备方法的科学研究进展, 在此基础上, 下文将分析各类制备方法的专利数量及占比情况(图13a), 以及复合型研发关键主体在各类制备方法上的专利布局(图13b)和研发要点, 以此考察制备方法的技术开发进展和产业化前景.

各类制备方法专利中, 高温热解法专利数量达727件, 占比70.4%, 显著高于其他制备方法, 是制备方法最重要的技术开发方向. 复合型研发关键主体与高温热解法的节点形成广泛而密集的连线, 表明绝大多数复合型研发关键主体均在此方向进行了重点技术开发. 相关专利主要通过前驱体结构设计、热解工艺参数优化、载体界面调控等关键环节来提升SACs的稳定性与催化活性[102~104].

电化学沉积法专利数量为54件, 占比5.2%. 中国科学技术大学、北京化工大学、浙江大学等五家复合型研发关键主体在此方向积极开展布局, 技术开发重点集中于前驱体浓度、沉积电位、时间等参数的精准调控, 旨在实现单原子的均匀负载与活性位点的有效构建, 从而提升电催化性能[105~107].

光化学合成法的专利数量不高(37件, 占比3.6%), 但中国科学院大连化学物理研究所、中国科学技术大学、北京化工大学等八家复合型研发关键主体都将该制备方法作为技术开发的重点方向, 相关专利主要关注紫外光与氙灯光源驱动的制备技术[108,109], 反映出光化学合成法在特定应用场景下的价值.

快速焦耳热法虽然在科学研究层面受到广泛关注, 但在技术开发层面未受到同等重视, 专利数量仅为20件, 占比1.9%, 在复合型研发关键主体中, 仅中国科学技术大学在此方向进行了少量专利布局, 表明此方面科学成果向技术成果的转化度仍有较大提升空间.

高能球磨法与原子层沉积法的专利数量相当, 分别为18件(占比1.7%)、16件(占比1.5%), 但复合型研发关键主体在高能球磨法上的专利布局明显强于原子层沉积法, 这主要是由于高能球磨法不仅能够直接合成SACs, 还能用于辅助实现催化剂的规模化制备, 具备较优的工艺扩展性.

其他制备方法的专利共计161件, 占比15.6%, 主要包括湿化学法、化学气相沉积法、物理气相沉积法等

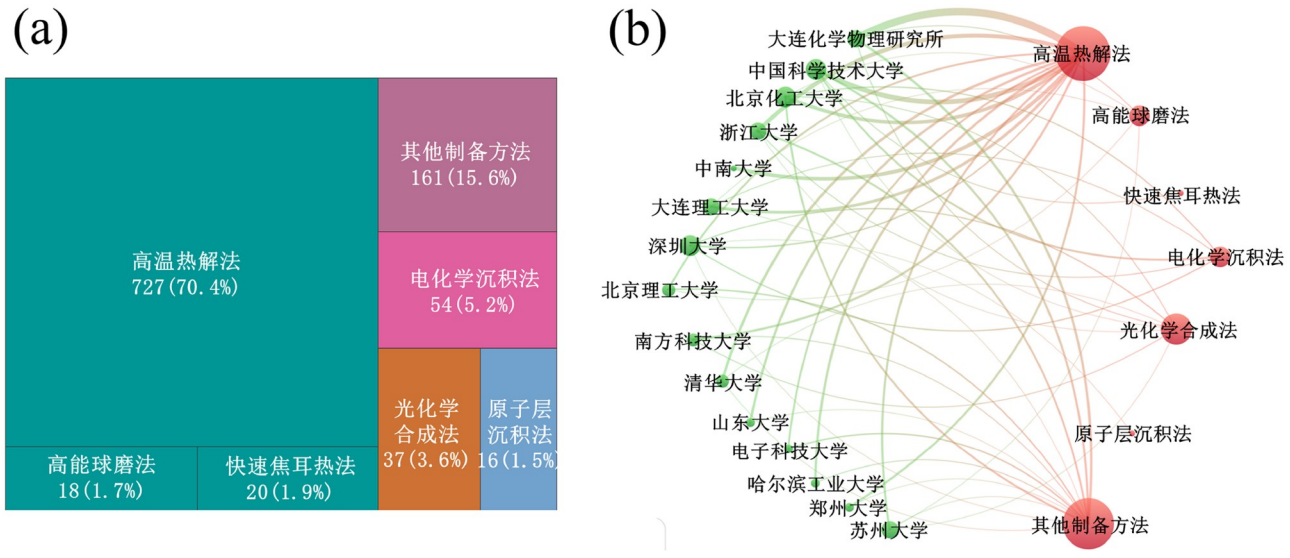


图 13 (网络版彩图) (a) 各类制备方法的专利数量及其占比. (b) 复合型研发关键主体在各类制备方法上的专利布局(注: 若一件专利涉及多种制备方法, 会在各种方法中分别计数, 因此图(a)中各类制备方法的专利数量之和会超过检索结果显示的专利总量)

Figure 13 (Color online) (a) Number and proportion of patents for various preparation methods. (b) Patent distribution of key integrated R&D entities in various preparation methods (Note: If a patent involves multiple preparation methods, it will be counted separately for each method. Therefore, the total number of patents for various preparation methods in panel (a) will exceed the total number of patents shown in the search results.)

多种技术路径, 值得注意的是, 融合机器学习的理论计算模型也逐渐受到研发主体的重视[110,111].

4 单原子电催化剂载体材料的研发进展

4.1 载体材料的科学研究进展

4.1.1 碳基载体

碳基载体被广泛用作SACs的基底[112~115], 这主要得益于其丰富的可调控性与多样的存在形式. 一般来说, 碳骨架中存在空位、吡啶氮等多种锚定位点, 能够与金属原子形成强配位作用, 不仅可以有效稳定高表面能的金属单原子并抑制其团聚, 还能实现对单原子配位环境的调控, 优化金属中心的电子结构和反应中间体吸附能, 从而改变催化反应的活性、选择性和稳定性[116~119]. 当前, 碳基载体主要分为石墨化碳和有机碳两大类. 石墨化碳可进一步细分为更具经济性的商业碳(如石墨烯、碳纳米管、碳黑等)与经由含碳前驱体热解一体化制备的自制石墨化碳, 其中自制石墨化碳的前驱体来源广泛, 涵盖有机化合物、聚合物、生物质以及MOF等, 这类材料的多样性与可调控性进一步推动了碳基载体在结构与功能设计方面的研究进展. 有机碳载体以无需高温碳化的有机聚合物和MOF材料为主, 通常具有良好的导电性和热稳定性, 其体系中含有的大量配位杂原子, 易与金属原子形成稳定配位, 从而实现单原子的均匀负载. 尽管有机碳载体因自身局限性在催化应用中面临较多挑战, 相关研究相对较少, 但通过合理的配位结构设计, 其在某些特定反应中仍展现出优异的催化活性.

在现有调控策略中, 缺陷工程[120~122]、杂原子掺杂[123~125]、曲率调控[126~128]以及多金属位点协同[129~131]等手段已成为提升材料催化性能的重要途径. 其中, 缺陷工程通过降低活性位点配位数、打破局部对称性来诱导电荷重新分布, 从而实现电子结构的整体优化与催化性能的提升. Cho等[132]发现低配位Pt-N_3V位点可打破几何对称性(图14a), 使Pt的d带中心下移, 显著削弱中间体吸附, 将氯析出反应的吉布斯自由能跨度降至0.05 eV, 远低于Pt-N_4位点的0.32 eV, 最终在1.45 V_{RHE}下实现39 mA/cm^{2}的高电流密度. 杂原子掺杂是一种高效且普遍应用的调控策略, 常用掺杂元素包括N、S、P、O等. 这些杂原子通过其电子差异诱导金属中心电子结构变化, 改变配位环境, 从而影响反应路径与选择性. Qian等[133]制备了不同P/N配位的钴SACs (Co-P_xN_{4-x}-C, x=0~3), 其中Co-P_2N_2-C的碱性HER性能最优, 这源于P配位优化了钴位点的电子结构, 降低了水分解能垒并优化了氢吸附自由能(图14b). 碳载体的几何曲率对催化性能的影响也较为显著. Zhao等[134]构建了具有中空多层纳米凸起结构的碳载体, 并通过曲率效应调控其上Fe单原子位点的电子结构, 成功制备了曲面铁/氮-碳催化剂(CS Fe/N C), 该催化剂在酸性介质中表现出优异的氧还原活性, 在氢气-空气条件下实现了0.75 W/cm^{2}的功率密度(图14c). 随着研究的深入, 双金属原子被认为比单金属原子具有更高的催化活性. 凭借金属原子间的电子协同效应, 这类催化剂能够突破单一金属位点在中间体吸附能上的限制, 实现性能跨越. Xu等[135]在硫掺杂石墨泡沫上精准合成了非对称Pt_2 DACs (Pt_2/SGF), 通过Pt-Pt协同效应将氢吸附自由能优化至−0.06 eV, 在酸性HER中仅需24.2 mV过电位即可达到10 mA/cm^2, 质量活性为Pt_1单原子的5.4倍(图14d). 上述调控手段同样适用于有机碳载体. 例如, Zhang等[136]在聚酰亚胺载体上锚定Pt单原子(Pt_1/PI), 利用其富电子共轭结构优化Pt电子结构并发挥质子富集作用, 在酸性HER中质量活性达商业Pt/C的12倍, 并在1000 mA/cm^{2}下稳定运行610 h (图14e).

4.1.2 非碳基载体

非碳基载体在单原子电催化剂领域同样展现出独特优势, 其固有的电子结构、配位环境和金属-载体相互作用, 可显著调控单原子位点的催化性能. 目前, 金属氧化物、碳化物、硫化物及磷化物的研究最为广泛, 不仅能通过O、C、S、P等阴离子与单原子形成配位, 还可提供第二金属元素作为辅助催化位点[137,138]. 进一步地, 通过构筑阴/阳离子空位、引入晶格应变或利用强金属-载体相互作用等方式, 能够有效调控单原子的局部配位结构. 与化学惰性较强的碳材料不同, 此类金属化合物载体本身亦具有一定的催化活性, 或可影响表界面微环境. 同时, 许多化合物载体在苛刻条件下也表现出良好的化学稳定性和机械强度. 这些因素都推动了非碳基载体在单原子领域研究的多样化发展. Song等[139]通过在Ru单原子掺杂的Mn_3O_4 (Ru-Mn_3O_4)表面电场诱导构建多孔MnO_2纳米护盾, 成功封装Ru活性位点, 在176 mV过电位下实现10 mA/cm^{2}的酸性

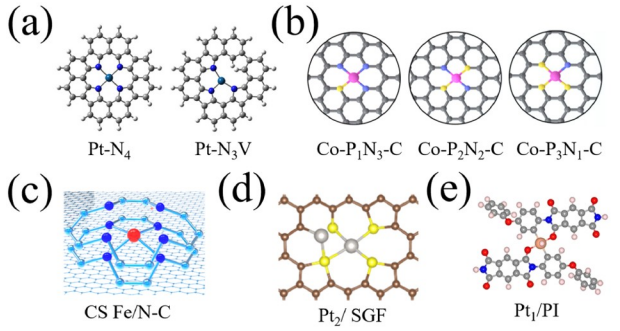


图 14 (网络版彩图) (a) 碳载Pt-N_4与Pt-N_3V单原子模型[132]. (b) 碳载不同配位环境的钴单原子模型, 包括Co-P_1N_3-C、Co-P_2N_2-C和Co-P_3N_1-C三种构型[133]. (c) 弯曲碳载Fe/N-C单原子模型[134]. (d) 碳载的Pt_2/SGF双金属原子模型[135]. (e) 聚酰亚胺(PI)负载的Pt_1/PI单原子模型[136]

Figure 14 (Color online) (a) Atomic models of Pt-N_4 and Pt-N_3V single-atoms supported on carbon [132]. (b) Atomic models of cobalt single-atoms with different coordination environments supported on carbon, including Co-P_1N_3-C, Co-P_2N_2-C, and Co-P_3N_1-C configurations [133]. (c) Atomic model of Fe/N-C single-atoms supported on curved carbon [134]. (d) Atomic model of Pt_2/SGF bimetallic atoms supported on carbon [135]. (e) Atomic model of Pt_1/PI single-atoms supported on polyimide (PI) [136].

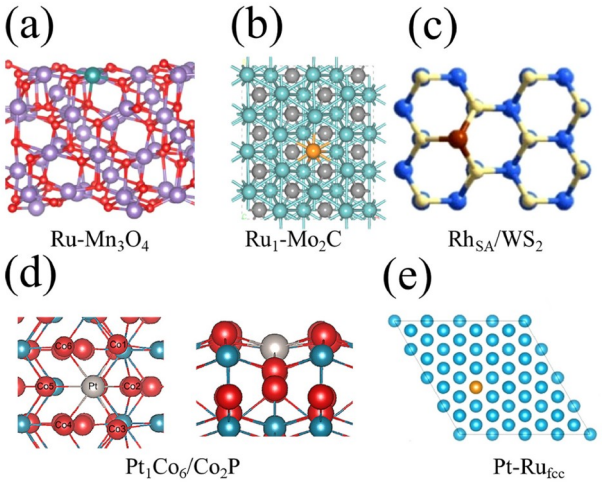


图 15 (网络版彩图) (a) Ru-Mn_3O_4单原子模型[139]. (b) Ru_1-Mo_2C单原子模型[140]. (c) Rh_{SA}/WS_2单原子模型[141]. (d) Pt_1Co_6/Co_2P单原子模型[142]. (e) Pt-Ru_{fcc}单原子模型[148]

Figure 15 (Color online) (a) Ru-Mn_3O_4 single-atom model [139]. (b) Ru_1-Mo_2C single-atom model [140]. (c) Rh_{SA}/WS_2 single-atom model [141]. (d) Pt_1Co_6/Co_2P single-atom model [142]. (e) Pt-Ru_{fcc} single-atom model [148].

析氧性能, 并可稳定运行超过一年(图15a). Chao等[140]通过在富含缺陷的Mo_2C纳米片上锚定Ru单原子(Ru_1-Mo_2C), 利用基底诱导的电荷重排触发可逆氢溢流机制, 在碱性HER中实现了16.7倍于Pt/C的质量活性与超过200 h的稳定性(图15b). Gao等[141]通过在碳纳米管支撑的弯曲WS_2表面锚定Rh单原子(Rh_{SA}/WS_2), 利用基底诱导的拉伸应变调控Rh位点的d_{x2}轨道对称性, 打破了传统d带中心理论的预测, 从而在酸性HER中实现了65倍于商业Pt/C的质量活性(图15c). Jiang等[142]在自适应纳米多孔Co_2P基底上构建金属态Pt_1Co_6单分散位点(Pt_1Co_6/Co_2P), 利用该位点诱导界面水结构重组并富集K^+离子以协同促进H–OH键断裂与Pt–H键形成. 其在碱性HER中实现了21 mV的低过电位, 并于阴离子交换膜水电解槽中, 在1.71 V达到1.0 A/cm^2的工业电流密度(图15d). 合金单原子(single-atom alloy, SAA)催化剂是将一种金属以原子级分散形式嵌入另一种金属宿主中, 兼具单原子高分散性与合金协同效应, 通过合金键重构活性位点的电子结构, 从而调控其催化性能[143~147]. Jiang等[148]利用CuPd合金模板调控Ru壳层晶相并锚定Pt单原子(Pt-Ru_{fcc}), 通过协同作用优化H/OH吸附, 使催化剂在碱性HER仅需8.5 mV过电位即可达到10 mA/cm^2, 质量活性为商业Pt/C的18倍, 且稳定性超过400 h (图15e).

综上所述, 载体的多样性为SACs的结构与性能调控提供了广阔空间. 在选择载体时, 需围绕目标催化反应的特点, 综合考虑其导电性、稳定性及成本等因素. 合理的载体选择与设计不仅能够在原子尺度上精细调控活性中心的电子结构, 也能在宏观层面有效影响催化剂的活性和稳定性. 因此, 精准的载体设计是实现高性能SACs可控制备与优化的关键.

4.2 载体材料的技术开发进展

前文通过梳理论文成果呈现了单原子电催化剂各类载体材料的科学研究进展, 在此基础上, 下文将分析各类载体材料的专利数量及占比情况(图16a), 以及复合型研发关键主体在各类载体材料上的专利布局(图16b)和研发要点, 以此考察载体材料的技术开发进展和产业化前景. 需说明的是, 本部分各类专利的占比都是指在所有载体材料专利总量中的占比.

碳基载体材料凭借其优异的导电性、可调控的孔道结构和良好的化学稳定性成为当前载体材料技术开发的主流方向, 相关专利数量为1001件, 占比78.8%, 显著高于非碳基载体材料专利数量(270件, 占比21.2%).

从碳基载体的细分类型来看, 石墨化碳载体相关

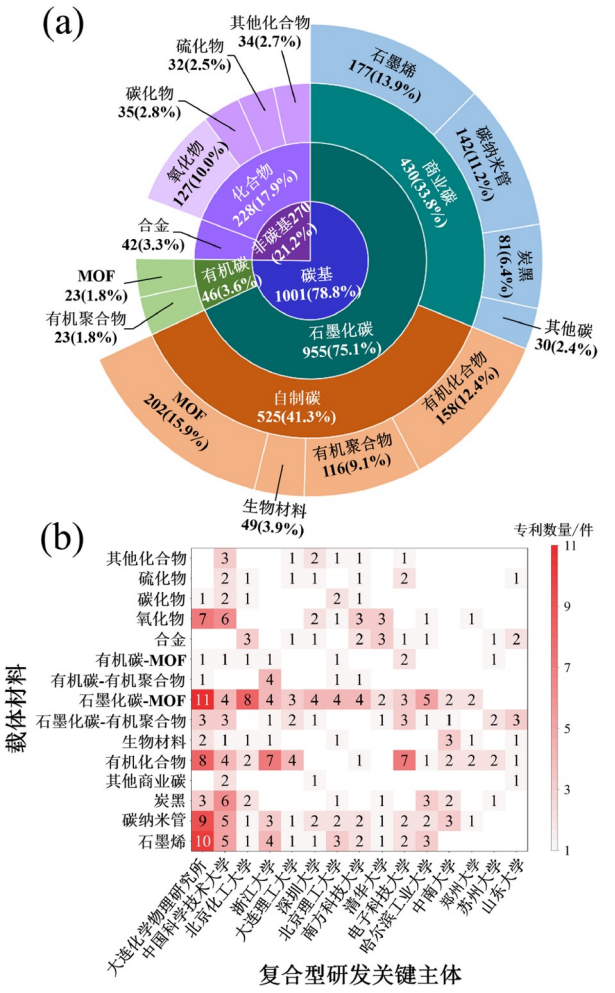


图 16　(网络版彩图) (a) 各类载体材料的专利数量及其占比. (b) 复合型研发关键主体在各类载体材料上的专利布局(注: 若一件专利涉及多种载体材料, 会在各种材料中分别计数, 因此图(a)中各类载体材料的专利数量之和会超过检索结果显示的专利总量)

Figure 16　(Color online) (a) Number and proportion of patents for various support materials. (b) Patent distribution of key integrated R&D entities in various support materials (Note: If a patent involves multiple support materials, it will be counted separately for each material. Therefore, the total number of patents for various support materials in panel (a) will exceed the total number of patents shown in the search results.)

专利为955件, 占比75.1%, 有机碳载体相关专利数量仅为46件, 占比3.6%. 可见, 石墨化碳载体技术路径的受关注度较高, 而有机碳载体技术开发程度相对有限.

在石墨化碳载体内部, 商业碳载体相关专利为430件, 占比33.8%, 主要以石墨烯(177件, 占比13.9%)和碳纳米管(142件, 占比11.2%)为代表, 这两类均是中国科学院大连化学物理研究所、中国科学技术大学等多家复合型研发关键主体的重要开发方向. 石墨烯载体相关专利技术多集中于氮掺杂改性及其与化合物构建复合载体体系[149,150], 碳纳米管相关专利技术则重点关注氮原子掺杂与微观结构调控[151,152]. 商业炭黑载体相关专利为81件, 占比6.4%, 其他商业碳(富勒烯、石墨炔等)专利为30件, 占比2.4%.

在石墨化碳载体内部, 自制碳载体的相关专利共计525件, 占比41.3%. 在自制碳载体中, 以MOF为前驱体的专利共202件, 占比15.9%, 是中国科学院大连化学物理研究所、北京化工大学等13家复合型研发关键主体的技术开发重点, 沸石咪唑酯骨架(zeolitic imidazolate framework, ZIF)系列衍生的碳基SACs受到的关注尤为凸显[153~155]; 有机化合物专利为158件, 占比12.4%, 有机聚合物专利为116件, 占比9.1%, 前者被复合型研发关键主体关注的程度明显高于后者; 生物材料(如壳聚糖、农业废弃物等)专利数量较少(49件, 占比3.9%), 但因其可再生优势也受到多家复合型研发关键主体的关注[156,157].

在非碳基载体材料中, 氧化物载体材料专利数量较多(127件, 占比10.0%), 以CeO_2、TiO_2等具有氧化还原特性的金属氧化物专利为主[158,159], 是中国科学院大连化学物理研究所、中国科学技术大学等复合型研发关键主体的技术开发重点, 这主要归因于氧化物具有高比表面积、丰富的金属或氧空位以及表面羟基等特性, 使其在稳定单金属原子方面相较于其他载体更具优势[160,161]. 硫化物、碳化物、其他化合物、合金载体材料的专利数量较少, 被复合型研发关键主体关注的程度也较低, 技术开发相对有限.

综上, 单原子电催化剂载体材料方面的技术开发高度聚焦于碳基材料, 尤其是石墨化碳载体, 其中商业化石墨烯、碳纳米管、自制MOF和有机化合物衍生碳材料有可能成为未来产业化和市场竞争的热点. 非碳基载体的技术开发程度低于碳基载体, 其中吸纳研发资源较多、产业化潜力较好的主要是氧化物材料.

5　总结与展望

研发兼具高活性、高稳定性、规模化可行性的单原子电催化剂具有重要意义. 本文系统阐述了单原子电催化剂总体研发态势, 深度剖析了其制备方法、载体材料的研发进展.

该领域的科学研究在单原子位点精准解析、局部配位结构精细调控、原子理论模拟与电催化机理阐释等方面取得了长足的进展, 在科学研究的引领下, 该领域的技术开发在适用于电催化体系的载体材料体系的多功能化拓展、合成策略的多样化创新、制备装备的迭代升级等方面取得突破和进步, 研发成果有望在电化学能源转化、绿色电合成、环境保护等方面带来广泛而深刻的变革. 但该领域的研发仍面临诸多挑战, 存在许多有待推进的创新方向.

在科学研究层面, 需要重点关注以下几方面挑战和创新思路.

(1) 跨研究重现性. 单原子电催化剂的原子级精准设计对合成条件要求极高, 易导致结果难以复现. 因此, 开发普适性强、可精准复现的合成策略, 是实现跨研究可靠、可比并推动实际应用的前提.

(2) 电极表界面单原子分布的可控性. SACs的高载量属性不等同于高暴露性, 许多处在载体体相内的单原子较难参与表界面电催化反应. 实现单原子在导电载体表面及三相界面区域的定点、定量锚定的精准设计仍充满挑战.

(3) 多样化原位电化学分析的相互佐证. 发展并交叉应用多种电催化工况下原位表征技术, 通过多维度、原子级原位信息的相互佐证与补充, 捕捉单原子在电催化反应过程中的动态演变行为, 有利于减少单一表征下的不全面分析和误判.

(4) 针对单个单原子的差异化电化学分析. 不同单原子位点因局部配位、应变等细微差异, 可导致电子态与反应性显著不同. 推动原子级分辨电化学表征技术, 探测单个原子的电子结构与个体电催化行为, 有利于揭示在电场下的个体贡献与宏观性能间的内在关联.

(5) 适用于电催化体系的载体材料的筛选设计模式. 传统的载体材料筛选设计模式周期长、成本高, 应推动“经验试错”模式转向“理性构建”模式, 强化理论计算与人工智能的驱动作用, 结合高通量计算和机器学习, 针对导电性、稳定性、吸附能等关键电催化性能描述符, 对材料属性的大数据集合进行特征提取与模型构建, 实现性能预测与最优配方的智能筛选, 提高研发精度与效率.

在技术开发层面, 需要重点关注以下几方面挑战和创新思路.

(1) 制备方案规模化可行性与经济性的兼顾. 科学研究采用的合成方法通常面临成本高、步骤多、产量低等问题, 而产业化需要成本适宜、工艺简易且环境友好的规模化制备方案. 因此, 适用于气体扩散电极、质子交换膜电极等器件化应用的单原子电催化剂制备技术必须平衡兼顾规模化可行性和经济性, 才能有效回应工业应用需求.

(2) 产品一致性与稳定性. 从实验室样品到工业产品涉及多步工程工艺放大问题, 在单原子电催化剂吨级生产的精细控制中需要重视产品批次间的一致性与稳定性.

(3) 单原子电催化剂在工业条件下的性能. 由于实验室规模与工业规模差异巨大, 因此单原子电催化剂的性能评估需要直面苛刻的工业环境, 特别要考察其在高电流密度、长时间运行场景下的电化学稳定性、抗团聚能力、抗中毒能力、选择性保持能力.

(4) 科学成果的技术转化及产业应用. 如前所述, 单原子电催化剂领域的科学研究对技术开发的影响度经历了多年的上升之后出现回落, 部分原因在于一些科学研究的前沿成果尚未被技术开发借鉴转化. 例如, 通过多原子协同效应来提高电催化性能是电催化科学研究的前沿成果, 已被许多论文阐述, 但尚未在专利文献中凸显. 另一方面, 企业的参与度不足, 也会制约科学成果的技术转化与产业应用. 目前单原子电催化剂领域的全球关键创新主体绝大多数属于高校院所, 企业的创新贡献相对逊色. 值得注意的是, 中国企业的研发成果少于日本、韩国的企业, 与中国高校院所在该领域的全球领军地位形成反差. 这种情况与我国以高校院所为主力的研发格局有关, 也反映出我国科学界、产业界之间的跨界合作、双向赋能尚有较大提升空间. 可以从以下几个方面纾解上述问题. 首先, 从激励机制着手, 增强高校院所的“创新策源地”功能及其对产业界的辐射效应. 例如, 在高校院所及其科研人员的考核评价过程中, 可以把推动科技成果产业化的绩效作为关键指标, 并逐步提升其评价权重, 对于在产业化中做出突出贡献的科研人员, 可允许其对成果衍生收益享有实质性的分享权和支配权. 其次, 相关管理部门、行业协会应当发挥好“搭桥者”与“黏合剂”的作用, 在科研经费拨付、产业补贴发放、重大专项设立、技术标准制定等方面引导构建强强联合、协同攻关的“产学研用联盟”和中试验证平台, 塑造全产业

链协作格局, 推动“材料-工艺-装备”一体化迭代, 通过“多点发力、多向并行”, 协同突破产业化瓶颈, 加快形成新质生产力. 此外, 还应发挥科技金融的杠杆作用, 对于优质创新主体的专利质押融资申请, 可在放贷额度、利息费用、还款周期等方面给予专项优惠, 为其深化研发、扩大规模提供资金支持. 氢能产业(如电解水制氢、燃料电池)与电化学合成(如CO_2还原制化学品)是单原子电催化剂工业应用潜力尤为巨大的领域, 可作为上述思路对策的试点. 此外, 石油化工产业是我国单原子催化产学研合作及工业应用的前沿地带, 相关经验也可以为单原子电催化剂的成果转化与产业应用提供借鉴.

(5) 研发成果的保护与运营. 我国单原子电催化剂研发主体的国际专利布局较为薄弱, 有必要提高国际专利布局的广度和密度, 避免原创成果因缺少产权保护而遭遇价值流失, 还应积极推动我国自主可控的专利技术进入国际标准, 将我国在该领域的先发优势充分转化为核心竞争力和话语权. 单原子电催化剂的突破创新对国际科技博弈具有重要影响, 部分研发成果可能涉及国家重大利益进而难以作为普通专利来保护运营, 此种情况下, 可将其作为保密专利、国家秘密、商业秘密来保护运营.

参考文献

1 Yu S, Wang Y, Wei Z. *Sci China Mater*, 2025, 68: 3060–3074
2 Huang C, Chen X, Liu L, Yu J, Zheng R, Li J, Wei Z. *Angew Chem Int Ed*, 2026, 65: e23391
3 Jeong T, Kim K, Kim BH, Choi SI, Choi CH, Kang J, Kim M. *Adv Sci*, 2025, 12: 2502230
4 He Y, Liu L, Zhu C, Guo S, Golani P, Koo B, Tang P, Zhao Z, Xu M, Zhu C, Yu P, Zhou X, Gao C, Wang X, Shi Z, Zheng L, Yang J, Shin B, Arbiol J, Duan H, Du Y, Heggen M, Dunin-Borkowski RE, Guo W, Wang QJ, Zhang Z, Liu Z. *Nat Catal*, 2022, 5: 212–221
5 Chen Z, Yang TC, Yang CM, Bao C, Jiang Z, Deng S, Lai NC. *Chem Eng J*, 2025, 516: 164156
6 Wang A, Li J, Zhang T. *Nat Rev Chem*, 2018, 2: 65–81
7 Qiao B, Wang A, Yang X, Allard LF, Jiang Z, Cui Y, Liu J, Li J, Zhang T. *Nat Chem*, 2011, 3: 634–641
8 Wang Y, Huang X, Wei Z. *Chin J Catal*, 2021, 42: 1269–1286
9 Wang J, Li Z, Wu Y, Li Y. *Adv Mater*, 2018, 30: 1801649
10 Chen W, Ma Y, Li F, Pan L, Gao W, Xiang Q, Shang W, Song C, Tao P, Zhu H, Pan X, Deng T, Wu J. *Adv Funct Mater*, 2019, 29: 1904278
11 Chen F, Jiang X, Zhang L, Lang R, Qiao B. *Chin J Catal*, 2018, 39: 893–898
12 Li JC, Wei Z, Liu D, Du D, Lin Y, Shao M. *Top Curr Chem*, 2019, 377: 4
13 Ma T, Li H, Yu Y, Wang K, Yu W, Shang Y, Bai Y, Zhang R, Yang Y, Nie X. *Small Methods*, 2024, 8: 2400530
14 Ren Y, Wang J, Zhang M, Wang Y, Cao Y, Kim DH, Liu Y, Lin Z. *Small*, 2024, 20: 2308213
15 Wei Z. *Electrochemical Catalysis*. Beijing: Chemical Industry Press, 2022 (in Chinese) [魏子栋. 电化学催化. 北京: 化学工业出版社, 2022]
16 Wei Y, Li X, Gu Y, Ding L, Gao X, Zhang Z, Kvarnström C, Bobacka J, Ivaska A, Tian ZQ, Wang ZL, Wei D. *Nat Commun*, 2025, 17: 402
17 Bai X, Zhao X, Zhang Y, Ling C, Zhou Y, Wang J, Liu Y. *J Am Chem Soc*, 2022, 144: 17140–17148
18 Van Rijn T, Timmis JK. *Microb Biotechnol*, 2023, 16: 683–696
19 Gu W, Wang J, Zhang Y, Liang S, Ai Z, Li J. *Interact J Med Res*, 2024, 13: e48259
20 Johan E, Stonier J. *Exchanging Value: Negotiating Technology Licensing Agreements*. Geneva: World Intellectual Property Organization Publication, 2005
21 Organization for Economic Co-operation and Development (OECD). *Patent Statistics Manual*. Paris: OECD Publishing, 2009
22 Qi Y, Zhu N, Zhai Y, Ding Y. *Scientometrics*, 2018, 115: 893–911
23 Gong H, Zou H, Liang X, Meng S, Cai P, Xu X, Qu J. *Sci Data*, 2025, 12: 1261
24 Acosta M, Coronado D. *Res Policy*, 2003, 32: 1783–1803
25 Ahmadpoor M, Jones BF. *Science*, 2017, 357: 583–587
26 Chen X, Mao J, Li G. *J Informetr*, 2024, 18: 101548
27 Zhang BW, Wang YX, Chou SL, Liu HK, Dou SX. *Small Methods*, 2019, 3: 1800497
28 Yan H, Cheng H, Yi H, Lin Y, Yao T, Wang C, Li J, Wei S, Lu J. *J Am Chem Soc*, 2015, 137: 10484–10487

29 Yin P, Yao T, Wu Y, Zheng L, Lin Y, Liu W, Ju H, Zhu J, Hong X, Deng Z, Zhou G, Wei S, Li Y. *Angew Chem*, 2016, 128: 10958–10963

30 Chen W, Pei J, He CT, Wan J, Ren H, Zhu Y, Wang Y, Dong J, Tian S, Cheong WC, Lu S, Zheng L, Zheng X, Yan W, Zhuang Z, Chen C, Peng Q, Wang D, Li Y. *Angew Chem Int Ed*, 2017, 129: 16302–16306

31 Fei H, Dong J, Feng Y, Allen CS, Wan C, Volosskiy B, Li M, Zhao Z, Wang Y, Sun H, An P, Chen W, Guo Z, Lee C, Chen D, Shakir I, Liu M, Hu T, Li Y, Kirkland AI, Duan X, Huang Y. *Nat Catal*, 2018, 1: 63–72

32 Chen Y, Ji S, Wang Y, Dong J, Chen W, Li Z, Shen R, Zheng L, Zhuang Z, Wang D, Li Y. *Angew Chem Int Ed*, 2017, 56: 6937–6941

33 Abbet S, Sanchez A, Heiz U, Schneider WD, Ferrari AM, Pacchioni G, Rösch N. *J Am Chem Soc*, 2000, 122: 3453–3457

34 Pan Y, Lin R, Chen Y, Liu S, Zhu W, Cao X, Chen W, Wu K, Cheong WC, Wang Y, Zheng L, Luo J, Lin Y, Liu Y, Liu C, Li J, Lu Q, Chen X, Wang D, Peng Q, Chen C, Li Y. *J Am Chem Soc*, 2018, 140: 4218–4221

35 Wang Y, Chen L, Mao Z, Peng L, Xiang R, Tang X, Deng J, Wei Z, Liao Q. *Sci Bull*, 2019, 64: 1095–1102

36 Fei H, Dong J, Chen D, Hu T, Duan X, Shakir I, Huang Y, Duan X. *Chem Soc Rev*, 2019, 48: 5207–5241

37 Ji S, Chen Y, Wang X, Zhang Z, Wang D, Li Y. *Chem Rev*, 2020, 120: 11900–11955

38 Huang Y, Xiong J, Zou Z, Chen Z. *Adv Mater*, 2025, 37: 2312182

39 Ying T, Shi X, Yi C, Hu J, Li D, Zhu R, Wang Y. *Nano Res*, 2025, 18: 94907528

40 Hossain MN, Zhang L, Neagu R, Sun S. *Chem Soc Rev*, 2025, 54: 3323–3386

41 Wan J, Zhang H, Yang J, Zheng J, Han Z, Yuan W, Lan B, Li X. *Appl Catal B-Environ Energy*, 2024, 347: 123816

42 Cheng Y, Zhao S, Johannessen B, Veder JP, Saunders M, Rowles MR, Cheng M, Liu C, Chisholm MF, De Marco R, Cheng HM, Yang SZ, Jiang SP. *Adv Mater*, 2018, 30: 1870088

43 Zhang P, Chen C, Zhang X, Jiang Z, Huang J, Chen J. *Electrochim Acta*, 2019, 298: 570–579

44 Wang X, Chen W, Zhang L, Yao T, Liu W, Lin Y, Ju H, Dong J, Zheng L, Yan W, Zheng X, Li Z, Wang X, Yang J, He D, Wang Y, Deng Z, Wu Y, Li Y. *J Am Chem Soc*, 2017, 139: 9419–9422

45 Han L, Cheng H, Liu W, Li H, Ou P, Lin R, Wang HT, Pao CW, Head AR, Wang CH, Tong X, Sun CJ, Pong WF, Luo J, Zheng JC, Xin HL. *Nat Mater*, 2022, 21: 681–688

46 Chang J, Jing W, Yong X, Cao A, Yu J, Wu H, Wan C, Wang S, Waterhouse GIN, Yang B, Tang Z, Duan X, Lu S. *Nat Synth*, 2024, 3: 1427–1438

47 Zhang YX, Zhang S, Huang H, Liu X, Li B, Lee Y, Wang X, Bai Y, Sun M, Wu Y, Gong S, Liu X, Zhuang Z, Tan T, Niu Z. *J Am Chem Soc*, 2023, 145: 4819–4827

48 Chen C, Chai J, Sun M, Guo T, Lin J, Zhou Y, Sun Z, Zhang F, Zhang L, Chen W, Li Y. *Energy Environ Sci*, 2024, 17: 2298–2308

49 Xiong H, Datye AK, Wang Y. *Adv Mater*, 2021, 33: 2004319

50 Lang R, Xi W, Liu JC, Cui YT, Li T, Lee AF, Chen F, Chen Y, Li L, Li L, Lin J, Miao S, Liu X, Wang AQ, Wang X, Luo J, Qiao B, Li J, Zhang T. *Nat Commun*, 2019, 10: 234

51 Jones J, Xiong H, DeLaRiva AT, Peterson EJ, Pham H, Challa SR, Qi G, Oh S, Wiebenga MH, Pereira Hernández XI, Wang Y, Datye AK. *Science*, 2016, 353: 150–154

52 Li S, Luo X, Wang Y, Wang C, Zhang G, Xiang H, Yan Y, Ke X, Lu Y, Yao C, Li H, Zhang L, Chen G. *Angew Chem Int Ed*, 2025, 64: e202504551

53 Yang Q, Jiang Y, Zhuo H, Mitchell EM, Yu Q. *Nano Energy*, 2023, 111: 108404

54 Deng D, Chen X, Yu L, Wu X, Liu Q, Liu Y, Yang H, Tian H, Hu Y, Du P, Si R, Wang J, Cui X, Li H, Xiao J, Xu T, Deng J, Yang F, Duchesne PN, Zhang P, Zhou J, Sun L, Li J, Pan X, Bao X. *Sci Adv*, 2015, 1: e1500462

55 Chen X, Yu L, Wang S, Deng D, Bao X. *Nano Energy*, 2017, 32: 353–358

56 Baláž P, Achimovičová M, Baláž M, Billik P, Cherkezova-Zheleva Z, Criado JM, Delogu F, Dutková E, Gaffet E, Gotor FJ, Kumar R, Mitov I, Rojac T, Senna M, Streletskiikl A, Wieczorek-Ciurowam K. *Chem Soc Rev*, 2013, 42: 7571–7637

57 Han GF, Li F, Rykov AI, Im YK, Yu SY, Jeon JP, Kim SJ, Zhou W, Ge R, Ao Z, Shin TJ, Wang J, Jeong HY, Baek JB. *Nat Nanotechnol*, 2022, 17: 403–407

58 Zhang Y, Guo L, Tao L, Lu Y, Wang S. *Small Methods*, 2019, 3: 1800406

59 Gan T, Liu Y, He Q, Zhang H, He X, Ji H. *ACS Sustain Chem Eng*, 2020, 8: 8692–8699

60 He X, Deng Y, Zhang Y, He Q, Xiao D, Peng M, Zhao Y, Zhang H, Luo R, Gan T, Ji H, Ma D. *Cell Rep Phys Sci*, 2020, 1: 100004

61 Wang H, Wang X, Pan J, Zhang L, Zhao M, Xu J, Liu B, Shi W, Song S, Zhang H. *Angew Chem*, 2021, 133: 23338–23342
62 Wang X, Ding S, Yue T, Zhu Y, Fang M, Li X, Xiao G, Zhu Y, Dai L. *Nano Energy*, 2021, 82: 105689
63 Song W, Xiao C, Ding J, Huang Z, Yang X, Zhang T, Mitlin D, Hu W. *Adv Mater*, 2024, 36: 2301477
64 Wang L, Huang L, Liang F, Liu S, Wang Y, Zhang H. *Chin J Catal*, 2017, 38: 1528–1539
65 Chen X, Yuan D, Rong C, Wu C, Liu P, Liu HK, Wang D, Dou SX, Dou Y. *Adv Powder Mater*, 2025, 4: 100330
66 Xiong G, Chen Y, Zhou Z, Liu F, Liu X, Yang L, Liu Q, Sang Y, Liu H, Zhang X, Jia J, Zhou W. *Adv Funct Mater*, 2021, 31: 2009580
67 Zhao Z, Sun J, Li X, Zhang Z, Meng X. *Appl Catal B-Environ*, 2024, 340: 123277
68 Xing L, Liu R, Gong Z, Liu J, Liu J, Gong H, Huang K, Fei H. *Nano Res*, 2022, 15: 3913–3919
69 Liu M, Zhang Z, Li C, Jin S, Zhu K, Fan S, Li J, Liu K. *Nat Commun*, 2025, 16: 6359
70 Chen W, Chen J, Bets KV, Salvatierra RV, Wyss KM, Gao G, Choi CH, Deng B, Wang X, Li JT, Kittrell C, La N, Eddy L, Scotland P, Cheng Y, Xu S, Li B, Tomson MB, Han Y, Yakobson BI, Tour JM. *Sci Adv*, 2023, 9: eadh5131
71 Tian Y, Wang S, Liu N, Xue Q, Qi X, Liu H, Cabot A, Liao L. *Chem Eng J*, 2025, 507: 160765
72 Lee HB, Veerasubramani GK, Lee KS, Lee H, Han TH. *Carbon*, 2022, 198: 252–263
73 Dou S, Xu J, Cui X, Liu W, Zhang Z, Deng Y, Hu W, Chen Y. *Adv Energy Mater*, 2020, 10: 2001331
74 Ren G, Zhao Z, Li Z, Zhang Z, Meng X. *J Catal*, 2023, 428: 115147
75 Wei J, Tang H, Sheng L, Wang R, Fan M, Wan J, Wu Y, Zhang Z, Zhou S, Zeng J. *Nat Commun*, 2024, 15: 559
76 Meese AF, Napier C, Kim DJ, Rigby K, Hedtke T, Leshchev D, Stavitski E, Parent LR, Kim JH. *Adv Mater*, 2024, 36: 2311341
77 Zhao X, He D, Xia BY, Sun Y, You B. *Adv Mater*, 2023, 35: 2210703
78 Lv YK, Wang K, Sun WY, Peng P, Zang SQ. *Adv Sci*, 2023, 10: 2304656
79 Yao R, Sun K, Zhang K, Wu Y, Du Y, Zhao Q, Liu G, Chen C, Sun Y, Li J. *Nat Commun*, 2024, 15: 2218
80 Zhang Z, Feng C, Liu C, Zuo M, Qin L, Yan X, Xing Y, Li H, Si R, Zhou S, Zeng J. *Nat Commun*, 2020, 11: 1215
81 Zhang L, Han L, Liu H, Liu X, Luo J. *Angew Chem*, 2017, 129: 13882–13886
82 Wang S, Lu M, Xia X, Wang F, Xiong X, Ding K, Pang Z, Li G, Xu Q, Hsu HY, Hu S, Ji L, Zhao Y, Wang J, Zou X, Lu X. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2024, 121: e2319136121
83 Liu P, Zhao Y, Qin R, Mo S, Chen G, Gu L, Chevrier DM, Zhang P, Guo Q, Zang D, Wu B, Fu G, Zheng N. *Science*, 2016, 352: 797–800
84 Wei H, Huang K, Wang D, Zhang R, Ge B, Ma J, Wen B, Zhang S, Li Q, Lei M, Zhang C, Irawan J, Liu LM, Wu H. *Nat Commun*, 2017, 8: 1490
85 Guo H, Wang L, Liu X, Mativenga P, Liu Z, Thomas AG. *Nanomaterials*, 2025, 15: 78
86 Li C, Chen Z, Yi H, Cao Y, Du L, Hu Y, Kong F, Kramer Campen R, Gao Y, Du C, Yin G, Zhang IY, Tong Y. *Angew Chem Int Ed*, 2020, 59: 15902–15907
87 Liu T, Gao W, Wang Q, Dou M, Zhang Z, Wang F. *Angew Chem*, 2020, 132: 20603–20607
88 Sun Z, Yang Y, Fang C, Yao Y, Qin F, Gu H, Liu Q, Xu W, Tang H, Jiang Z, Ge B, Chen W, Chen Z. *Small*, 2022, 18: 2203422
89 Wei H, Wu H, Huang K, Ge B, Ma J, Lang J, Zu D, Lei M, Yao Y, Guo W, Wu H. *Chem Sci*, 2019, 10: 2830–2836
90 Leskelä M, Ritala M. *Thin Solid Films*, 2002, 409: 138–146
91 Suntola T. *Reports*, 1989, 4: 261
92 George SM. *Chem Rev*, 2010, 110: 111–131
93 Lu J, Elam JW, Stair PC. *Acc Chem Res*, 2013, 46: 1806–1815
94 Lu J, Elam JW, Stair PC. *Surf Sci Rep*, 2016, 71: 410–472
95 Piernavieja-Hermida M, Lu Z, White A, Low KB, Wu T, Elam JW, Wu Z, Lei Y. *Nanoscale*, 2016, 8: 15348–15356
96 Yan H, Su C, He J, Chen W. *J Mater Chem A*, 2018, 6: 8793–8814
97 Fonseca J, Lu J. *ACS Catal*, 2021, 11: 7018–7059
98 Sun S, Zhang G, Gauquelin N, Chen N, Zhou J, Yang S, Chen W, Meng X, Geng D, Banis MN, Li R, Ye S, Knights S, Botton GA, Sham TK, Sun X. *Sci Rep*, 2013, 3: 1775
99 Liao M, Zhang Y, Miao X, Liang K, Song Z, Zhang L. *Adv Funct Mater*, 2026, 36: e18956
100 Yan H, Lin Y, Wu H, Zhang W, Sun Z, Cheng H, Liu W, Wang C, Li J, Huang X, Yao T, Yang J, Wei S, Lu J. *Nat Commun*, 2017, 8: 1070
101 Gu J, Jian M, Huang L, Sun Z, Li A, Pan Y, Yang J, Wen W, Zhou W, Lin Y, Wang HJ, Liu X, Wang L, Shi X, Huang X, Cao L, Chen S, Zheng X, Pan H, Zhu J, Wei S, Li WX, Lu J. *Nat Nanotechnol*, 2021, 16: 1141–1149

102 Liu B, Yang H, Huang Y, Liu S, Zhang T. Electro-reduction carbon dioxide catalytic material and preparation and application thereof (in Chinese). China Patent, 201710655090, 2017-08-03 [刘彬, 杨鸿斌, 黄延强, 刘松, 张涛. 一种电还原二氧化碳催化材料及其制备和应用. 中国专利, 201710655090, 2017-08-03]

103 Li Y, Chen Y, Li Z, Ji S, Wang D, Peng Q, Chen C. Iridium monatomic catalyst used for direct formic acid fuel cell and preparation method of catalyst (in Chinese). China Patent, 201710994086, 2017-10-23 [李亚栋, 陈远均, 李治, 冀淑方, 王定胜, 彭卿, 陈晨. 用于直接甲酸燃料电池的铱单原子催化剂及其制备方法. 中国专利, 201710994086, 2017-10-23]

104 Wang A, Niu S, Zhang T. Nitrogen-doped carbon-supported monoatomic oxygen reduction catalyst and preparation method thereof (in Chinese). China Patent, 201711230339, 2017-11-29 [王爱琴, 钮珊珊, 张涛. 一种氮掺杂碳载单原子氧还原催化剂及其制备方法. 中国专利, 201711230339, 2017-11-29]

105 He C, Zhang C, Hu Q, Yang H, Chai X, Fan L, Zhang Q, Liu J. Method for depositing single platinum atoms, compound and application (in Chinese). China Patent, 201810795400, 2018-07-19 [何传新, 张超, 胡琪, 杨恒攀, 柴晓燕, 范梁栋, 张黔玲, 刘剑洪. 一种沉积铂单原子的方法、复合物与应用. 中国专利, 201810795400, 2018-07-19]

106 Zhang Z, Liu C, Feng C, Zhou S, Zeng J. Ir/$Co_{0.8}Fe_{0.2}Se_2$-NF monatomic catalyst as well as preparation method and application thereof (in Chinese). China Patent, 201811203733, 2018-10-16 [张志荣, 刘春晓, 冯晨, 周仕明, 曾杰. 一种Ir/$Co_{0.8}Fe_{0.2}Se_2$-NF单原子催化剂及其制备方法、应用. 中国专利, 201811203733, 2018-10-16]

107 Cao R, Cai W, Lei Z, Jiao S. Noble metal monatomic catalyst for electrolyzing water to separate oxygen and preparation method and application thereof (in Chinese). China Patent, 202011273064, 2020-11-13 [曹瑞国, 蔡文斌, 雷占武, 焦淑红. 一种用于电解水析氧的贵金属单原子催化剂及其制备方法和应用. 中国专利, 202011273064, 2020-11-13]

108 Zhang F, Wang H, Xu J. Supported monoatomic Pd catalyst and preparation method and catalytic application thereof (in Chinese). China Patent, 201810463913, 2018-05-15 [张法智, 王红璐, 徐杰. 一种负载型单原子Pd催化剂及其制备方法和催化应用. 中国专利, 201810463913, 2018-05-15]

109 Zhang W, Zhu J, Wang Z, Liu J. Method for conveniently preparing noble metal monoatomic catalyst (in Chinese). China Patent, 201910390620, 2019-05-10 [张文静, 朱婧婷, 王卓, 刘季冬. 一种极简便制备贵金属单原子催化剂的方法. 中国专利, 201910390620, 2019-05-10]

110 Wang Y, Zhang G, Dong Y, Yu H, Hu Y, Shang Y, Pei L, Yang Z. A method, device and computer equipment for predicting performance of bimetallic atom catalyst (in Chinese). China Patent, 202410143555, 2024-02-01 [王雅, 张桂玲, 董禹歧, 于红, 胡玚玚, 尚岩, 裴蕾, 杨照地. 一种双金属原子催化剂性能预测方法、装置及计算机设备. 中国专利, 202410143555, 2024-02-01]

111 Zuo S, Qin S, Jiang Y, Wang N, Wu W, Zhang Y. Method for predicting thermodynamic and electrochemical stability of metal single-atom catalysts based on machine learning (in Chinese). China Patent, 202510671577, 2025-05-23 [左四进, 秦澍瀚, 蒋义炜, 王楠, 吴文海, 张银巧. 基于机器学习的金属单原子催化剂热力学与电化学稳定性预测方法. 中国专利, 202510671577, 2025-05-23]

112 Yang ZK, Yuan CZ, Xu AW. *Nanoscale*, 2018, 10: 16145–16152

113 Zhao S, Cheng Y, Veder JP, Johannessen B, Saunders M, Zhang L, Liu C, Chisholm MF, De Marco R, Liu J, Yang SZ, Jiang SP. *ACS Appl Energy Mater*, 2018, 1: 5286–5297

114 Gong YN, Jiao L, Qian Y, Pan CY, Zheng L, Cai X, Liu B, Yu SH, Jiang HL. *Angew Chem*, 2020, 132: 2727–2731

115 Markov PV, Smirnova NS, Baeva GN, Bukhtiyarov AV, Mashkovsky IS, Stakheev AY. *Mendeleev Commun*, 2020, 30: 468–471

116 Gawande MB, Fornasiero P, Zbořil R. *ACS Catal*, 2020, 10: 2231–2259

117 Liu JC, Xiao H, Li J. *J Am Chem Soc*, 2020, 142: 3375–3383

118 Lu B, Liu Q, Chen S. *ACS Catal*, 2020, 10: 7584–7618

119 Back S, Lim J, Kim NY, Kim YH, Jung Y. *Chem Sci*, 2017, 8: 1090–1096

120 Zhang L, Yang X, Lin J, Li X, Liu X, Qiao B, Wang A, Zhang T. *Acc Chem Res*, 2025, 58: 1878–1892

121 Yang XF, Wang A, Qiao B, Li J, Liu J, Zhang T. *Acc Chem Res*, 2013, 46: 1740–1748

122 Li W, Chen Z, Jiang X, Jiang J, Zhang Y. *Front Chem*, 2022, 10: 1011597

123 Fortunato GV, Gunnarson A, Hosseini H, You X, Bhuyan P, Choi JS, Jeon HS, Zhao X, Lourenço JC, Lim S, Wang H, Buzanich AG, Radtke M, Paciok P, Lanza MRV, Schüth F, Ledendecker M. *Adv Funct Mater*, 2026, 36: e16600

124 Qi Z, Zhou Y, Guan R, Fu Y, Baek JB. *Adv Mater*, 2023, 35: 2210575

125 Liu J, Zhu J, Xu H, Cheng D. *ACS Catal*, 2024, 14: 6952–6964

126 Wang Q, Lyu L, Pan H, Wang Z, Lee D, Liu J, Li Z, Lei Y, Kang YM. *ACS Mater Lett*, 2025, 7: 4005–4028
127 Wang B, Wang M, Fan Z, Ma C, Xi S, Chang LY, Zhang M, Ling N, Mi Z, Chen S, Leow WR, Zhang J, Wang D, Lum Y. *Nat Commun*, 2024, 15: 1719
128 Chen C, Zhang Z, Dai L, Li B, Li Z. *Appl Catal A-Gen*, 2025, 120160
129 Fu J, Dong J, Si R, Sun K, Zhang J, Li M, Yu N, Zhang B, Humphrey MG, Fu Q, Huang J. *ACS Catal*, 2021, 11: 1952–1961
130 Kim KM, Mun J, Yun GN, You YW, Park JH, Lee JH, So J, Shin HO, Kwon J, Kim S, Kang S, Kwon YK, Kwon TH, Bae YS, Lee G, Kim SJ, Kim YJ, Kim HT. *Nat Commun*, 2025, 16: 11617
131 Chen C, Sun M, Zhang F, Li H, Sun M, Fang P, Song T, Chen W, Dong J, Rosen B, Chen P, Huang B, Li Y. *Energy Environ Sci*, 2023, 16: 1685–1696
132 Cho J, Lim T, Kim H, Meng L, Kim J, Lee S, Lee JH, Jung GY, Lee KS, Viñes F, Illas F, Exner KS, Joo SH, Choi CH. *Nat Commun*, 2023, 14: 3233
133 Qian S, Xu F, Fan Y, Cheng N, Xue H, Yuan Y, Gautier R, Jiang T, Tian J. *Nat Commun*, 2024, 15: 2774
134 Zhao Y, Wan J, Ling C, Wang Y, He H, Yang N, Wen R, Zhang Q, Gu L, Yang B, Xiang Z, Chen C, Wang J, Wang X, Wang Y, Tao H, Li X, Liu B, Zhang S, Wang D. *Nature*, 2025, 644: 668–675
135 Xu J, Zhong H, Wu Y, Liu R, Zeng R, Yao Y, Jiang C, Xiang X, Li R. *J Am Chem Soc*, 2026, 148: 6895–6904
136 Zhang S, Wu Z, Liu Y, Bai J, Ding Y, Ma Z, Lin H, Zhang L, Liu T. *Adv Energy Mater*, 2025, 15: 2403945
137 Lang R, Du X, Huang Y, Jiang X, Zhang Q, Guo Y, Liu K, Qiao B, Wang A, Zhang T. *Chem Rev*, 2020, 120: 11986–12043
138 Sun T, Zang W, Sun J, Li C, Fan J, Liu E, Wang J. *Adv Funct Mater*, 2023, 33: 2301526
139 Song H, Yu J, Nie M, Cheng S, Tang Z, Lu S. *J Am Chem Soc*, 2026, 148: 2693–2702
140 Chao T, Xie W, Hu Y, Yu G, Zhao T, Chen C, Zhang Z, Hong X, Jin H, Wang D, Chen W, Li X, Hu P, Li Y. *Energy Environ Sci*, 2024, 17: 1397–1406
141 Gao T, Gu J, Yang C, Wang R, Wang C, Zhang P, Li J, Zheng X, Fan Y, Yang P, Hua X, Hui J, Zhang H. *J Am Chem Soc*, 2025, 147: 25385–25396
142 Jiang K, Liu Z, Wang Z, Xie F, Yuan X, Tan Y. *Adv Mater*, 2025, 37: 2419644
143 Hou Y, Wang X, Guo Y, Zhang X. *Nanoscale*, 2021, 13: 18695–18701
144 Climent MJ, Corma A, Iborra S. *Chem Rev*, 2011, 111: 1072–1133
145 Lyu Y, Zhan W, Yu Z, Liu X, Yang Y, Wang X, Song C, Yan Z. *J Mater Sci Tech*, 2021, 76: 86–94
146 Cheng N, Stambula S, Wang D, Banis MN, Liu J, Riese A, Xiao B, Li R, Sham TK, Liu LM, Botton GA, Sun X. *Nat Commun*, 2016, 7: 13638
147 Wang Q, Ina T, Chen WT, Shang L, Sun F, Wei S, Sun-Waterhouse D, Telfer SG, Zhang T, Waterhouse GIN. *Sci Bull*, 2020, 65: 1743–1751
148 Jiang W, Zhang SL, Yang J, Hu S, Duan D, Heng JZX, Wang Z, Yang W, Liu X, Yan Q, Zhang M, Wu WY, Hu J, Li J, Ding N, Teo SL, Chan CY, Lin M, Liu H, Loh XJ, Zhang YW, Liu Z, Ye E, Xiong Y, Zhao M. *J Am Chem Soc*, 2025, 147: 35293–35303
149 Ling M, Ji J, Liang C. Preparation method of nitrogen-doped graphene-loaded iron-cobalt bimetallic monatomic catalyst (in Chinese). China Patent, 202110460456, 2021-04-27 [凌敏, 吉加鹏, 梁成都. 一种氮掺杂石墨烯负载铁钴双金属单原子催化剂的制备方法. 中国专利, 202110460456, 2021-04-27]
150 Gu M, Wang Q, Zhao Z. Method for preparing monatomic catalyst (in Chinese). China Patent, 201911054720, 2019-10-31 [谷猛, 王琦, 赵志亮. 单原子催化剂的制备方法. 中国专利, 201911054720, 2019-10-31]
151 Xia C, Zheng T, Dai Y. The invention relates to a preparation method and application of a boron-nitrogen co-coordinating copper monatomic catalyst (in Chinese). China Patent, 202210740154, 2022-06-28 [夏川, 郑婷婷, 戴逸舟. 一种硼氮共配位铜单原子催化剂的制备方法及其应用. 中国专利, 202210740154, 2022-06-28]
152 Shang M. China Patent, Monatomic metal catalyst, preparation method of monatomic metal catalyst and ordered membrane electrode (in Chinese). 202110281488, 2021-03-16 [尚明丰. 单原子金属催化剂及其制备方法、有序化膜电极. 中国专利, 202110281488, 2021-03-16]
153 Fan L, Xu K. Zinc-containing monatomic catalyst as well as preparation method and application thereof (in Chinese). China Patent, 202010475821, 2020-05-29 [范梁栋, 徐括峰. 一种含锌单原子催化剂及其制备方法与应用. 中国专利, 202010475821, 2020-05-29]
154 Yuan J, Liu F. Preparation method of copper-indium bimetallic monatomic catalyst (in Chinese). China Patent, 202011074255, 2020-10-09 [元炯亮, 柳峰. 一种铜铟双金属单原子催化剂的制备方法. 中国专利, 202011074255, 2020-10-09].
155 Liu T, Li X, Xing F. A single-atom catalyst composite electrode for all-vanadium redox flow batteries and its preparation and application (in

Chinese). China Patent, 202111483125, 2021-12-07 [刘涛, 李先锋, 邢飞. 一种全钒液流电池用单原子催化剂复合电极及其制备和应用. 中国专利, 202111483125, 2021-12-07]

156 Chen W, Tang H, Li X. The invention relates to a preparation method and application of a carbon-based carrier supported sulfur coordination cobalt monoatomic catalyst (in Chinese). China Patent, 202210523582, 2022-05-31 [陈文星, 唐灏, 李欣远. 碳基载体负载的硫配位钴单原子催化剂的制备方法及应用. 中国专利, 202210523582, 2022-05-31]

157 Xiong Y, Liu D, Li B. The present invention relates to a method for preparing metal monatomic catalyst by using biomass and its application (in Chinese). China Patent, 202310472771, 2023-04-27 [熊禹, 刘东豪, 李宝. 一种利用生物质制备金属单原子催化剂的方法及其应用. 中国专利, 202310472771, 2023-04-27]

158 Xiong Y, Jiang Y, Li J, Long R. The invention relates to a supported copper catalyst as well as a preparation method and application thereof (in Chinese). China Patent, 202210111273, 2022-01-29 [熊宇杰, 江亚文, 李嘉威, 龙冉. 一种负载型铜催化剂及其制备方法和应用. 中国专利, 202210111273, 2022-01-29]

159 Shao Z, Wang J, Luo X. A catalyst for oxygen evolution reaction and its preparation method and application (in Chinese). China Patent, 202511239343, 2025-09-01 [邵志刚, 王建英, 罗旭. 一种析氧反应催化剂及其制备方法和应用. 中国专利, 202511239343, 2025-09-01]

160 Qiao B, Jiang X, Wu Z, Zhang B, Wu X. A ligand-assisted stabilized single-atom rhenium-based catalyst and its preparation method and application (in Chinese). China Patent, 202211583852, 2022-12-09 [乔波涛, 江训柱, 吴忠帅, 张波, 吴籼虹. 一种配体辅助稳定的单原子铼基催化剂及其制备方法和应用. 中国专利, 202211583852, 2022-12-09]

161 Wang D, Feng C, Zhang Z, Zeng J, Bao J. Iridium monatomic catalyst as well as preparation method and application thereof (in Chinese). China Patent, 202111468747, 2021-12-03 [王董弟, 冯晨, 张志荣, 曾杰, 鲍骏. 一种铱单原子催化剂、其制备方法及应用. 中国专利, 202111468747, 2021-12-03]

From scientific papers to technology patents: research and development progress in single-atom electrocatalysts

Ji Huang[1,2*], Wenting Jin[3], Mansheng Liao[4], Zidong Wei[5*]

[1] *Intellectual Property Institute, Civil and Commercial Law School (Intellectual Property School), Southwest University of Political Science and Law, Chongqing 401120, China*
[2] *Research Base for Implementation of the National Intellectual Property Strategy (SWUPL Base); Chongqing Intellectual Property Protection Collaborative Innovation Center, Chongqing 401120, China*
[3] *National Security College, Southwest University of Political Science and Law, Chongqing 401120, China*
[4] *College of Chemistry and Environmental Engineering, College of Physics and Optoelectronic Engineering, Shenzhen University, Shenzhen 518060, China*
[5] *School of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University, Chongqing 401331, China*
**Corresponding author (email: huangji@swupl.edu.cn; zdwei@cqu.edu.cn)*

Abstract: Single-atom catalysts (SACs) have emerged as a frontier hotspot in catalysis science, particularly in the field of electrocatalysis, owing to their extremely high atomic utilization efficiency and excellent catalytic performance. However, the inherently high surface energy of single-atoms renders SACs prone to migration and agglomeration during preparation and reaction, leading to degradation of catalytic activity, which is not only a key challenge in scientific research but also a major obstacle in technical development. Therefore, it is of great significance to develop electrocatalysts with high activity, high stability and practical scalability simultaneously. On the basis of literature review, this study integrates bibliometric analysis and adopts the knowledge flow from science to technology as an important perspective to comprehensively analyze scientific papers and technology patent documents, and based on this, we clarify the overall research and development situation of single-atom electrocatalysts, with a deep focus on progress in preparation methods and support materials. Finally, a summary and outlook are presented, and relevant recommendations are proposed.

Keywords: single-atom electrocatalysts, papers, patents, science-technology linkage, preparation methods, support materials

doi: 10.1360/SSC-2026-0067