Crystals：电催化剂材料进展 MDPI特刊征稿

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/39584.html

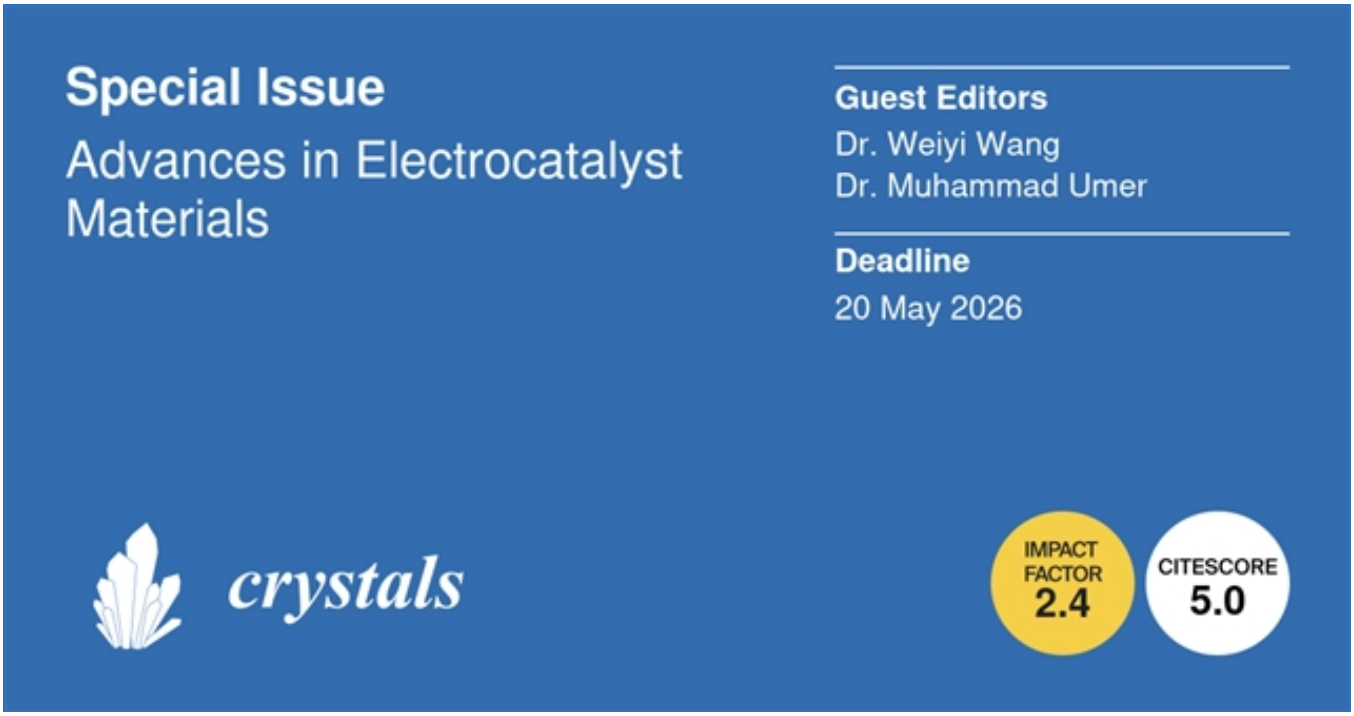
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

Crystals：电催化剂材料进展 MDPI特刊征稿。期刊名：Crystals

期刊主页：www.mdpi.com/journal/crystals

特刊背景：

在全球深入推进碳中和与可持续能源转型的背景下，高效、稳定的电催化剂材料正成为清洁能源技术发展的核心驱动力。为了进一步探索结构、组成与催化性能之间的内在联系，推动下一代高性能催化剂材料的设计与应用，Crystals期刊特邀中国科学技术大学汪伟毅副研究员与爱尔兰利默里克大学Muhammad Umer博士共同创办特刊Advances in Electrocatalyst Materials（电催化剂材料进展）。



本特刊旨在汇聚全球研究力量，系统展示电催化剂材料在关键能源转化反应中的最新进展。我们诚邀来自实验与计算领域的原创研究和综述论文，共同推动对反应机理的理解、催化性能的提升以及材料稳定性的优化。本特刊将为电催化剂材料领域的研究者提供一个高水平、跨学科的学术

交流平台。我们期待您的投稿，共同推动可持续能源材料的前沿发展。

特刊主题涵盖（但不限于）：

- 前沿关键电催化反应（HER、OER、ORR、CO?RR、NRR等）的机理解析与性能优化；
- 结构工程、电化学稳定性提升及界面调控策略，以实现卓越活性与耐久性；
- 电催化剂材料的设计、合成和高级表征；
- 多元材料体系的探索与应用（金属、合金、氧化物、硫族化物、氮化物、碳基材料及复合材料）；
- 原位与操作光谱学及显微技术在反应中间体与活性位点探测中的应用；
- 计算和机器学习方法（DFT、AIMD、MLPs、高通量筛选、微观动力学建模等）；
- 反应台阶图、电子结构和 Pourbaix 图分析，用于合理设计催化剂；
- 数据驱动和人工智能引导的策略，用于加速材料发现和性能预测；
- 面向实际电化学系统的选择性调控、降解机理解析与可扩展性研究。

投稿截止日期：2026年5月20日

客座编辑介绍

汪伟毅博士

中国科学技术大学国家微尺度研究中心特聘副研究员。他于中国科学技术大学化学物理系获得理学博士学位，后留校从事博士后研究。主要研究方向为理论与计算化学、物理化学，专注于基于第一性原理的量子输运方法开发及晶体对称性约束下的材料结构预测。作为核心开发者，他主导设计了国产热电输运计算程序Tetrans和材料结构搜索软件AISP，为功能材料的设计与模拟提供了重要工具。在Nature Communications、Advanced Materials、Journal of the American Chemical Society、Angewandte Chemie International Edition等国际高水平期刊发表SCI论文60余篇。他担任安徽省科技厅科研项目评审专家、高新技术企业认证专家、国家科技专家库专家，以及ChemPhys Mater、AI materials、AI Agent等期刊青年编委。作为材料智能计算与模拟（ICSM）团队负责人，与北京大学、西湖大学、悉尼大学、山东大学等国内外多所高校保持紧密合作关系，致力于推动计算材料学与实验研究的深度融合。

Muhammad Umer博士

爱尔兰利默里克大学博士后研究员。他于巴基斯坦真纳大学获得理学硕士和哲学硕士学位，后在韩国蔚山科学技术大学超功能材料中心攻读博士学位（师从Kwang S. Kim教授），于2023年获得博士学位。主要研究领域为计算催化、电化学能量转化和数据驱动的材料设计，擅长运用密度泛函理论、从头算分子动力学和机器学习力场等方法，揭示电催化剂、膜材料和固体电解质体系中

的反应能量学、活性位点动力学及界面化学机制。他致力于整合多尺度建模与机器学习势函数，将原子尺度的机理认识与实验性能相衔接，实现面向燃料电池、电池和可持续化学转化的异质结构材料的理性设计。目前参与欧盟"地平线2020"计划资助的HERMES项目，开展金属及金属氢化物基电催化体系的多尺度研究，推动清洁能源技术的创新与发展。

特刊链接：https://www.mdpi.com/journal/crystals/special_issues/KE036B5669

Crystals期刊介绍：

主编：Alessandra Toncelli, University of Pisa, Italy

Crystals期刊的主题涵盖晶体材料、晶体学研究相关的多个方面。目前已经被 SCIE、Scopus、Ei Compendex 等重要数据库收录。

2024 Impact Factor: 2.4 (Journal Citation Reports - Clarivate, 2025)

2024 CiteScore: 5.0 (Scopus, 2025)

Time to First Decision 12.7 Days

Acceptance to Publication 2.3 Days

来源：Crystals

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发