



中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7月5-8日, 2025
福建 厦门

**A06-纳米材料合成
及光电催化应用**

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



A06. 纳米材料合成及光/电催化应用

分会主席：王丹、张加涛、孙再成、何传新

A06-01

光解水晶态材料设计与反应机理研究

杨化桂*

华东理工大学

人工光合成技术可实现太阳能到化学能的高效稳定转化，是助力“碳达峰、碳中和”目标实现的理想途径，其核心是光化学能转换功能材料。针对光化学能转换功能材料电荷分离效率低、表面催化反应活性差等关键科学问题，开创了晶态捕光材料“活性晶面设计”这一重要突破性理念，在国际上率先从原子尺度澄清了光解水表面活性位点的构效关系，发展了单向抑制水分解逆反应的 PtO 助催化剂、打破析氧反应线性关系的 Rh0-Rh3+双功能助催化剂。近期又发展了一种固相合成晶面调控策略，通过固态前驱体再结晶可控制备暴露高活性{111}晶面的 SrTiO₃ 单晶光催化剂，实现了高效的光解纯水制氢。

A06-02

卟啉可控自组装及其光催化性能研究

白锋*

Henan University

自组装是超分子科学最关键的问题之一，是组装基元通过分子间的相互作用自发地形成有序结构的过程，是创造新物质和产生新功能的重要手段。通过设计调控组装基元间弱键相互作用实现对组装体结构、形貌、维数和尺寸的可控调控，获得具有特定功能的自组装体是自组装领域中的关键科学问题。围绕这个科学问题，我们开发了酸碱中和/胶束限域和微乳辅助/介相转移两种针对不同卟啉超分子可控自组装方法，实现了对卟啉功能纳米组装体尺寸、形状、结构、组成和排列的人为控制，解决了卟啉超分子自组装中可控性及规模化生产的问题。卟啉组装体很好的继承了卟啉单分子的光学特性，同时由于分子堆积方式不同又赋予组装体不同于单分子的特性。我们通过控制分子堆积方式控制组装体吸收可见光后产生的不同活性成分，获得不同用途的卟啉组装材料，实现了结构构筑与功能组装相统一。并将其用于可见光降解有机污染物和光解水制氢，体现出很好的增强效果和结构依赖性。

A06-03

“一体化”光催化剂的构建及应用

孙再成*

Beijing University of Technology

光催化技术被广泛的应用于清洁能源，绿色合成等领域，而且收到越来越多的重视和关注。然而光催化剂的光吸收、电荷传输效率和活性位点的调控依然是影响该技术深入发展的关键因素。本次报告围绕构建一体化光催化剂在产氢以及有机偶联反应上开展了系列的研究工作。发展了 Ga1/CN 一体化光催化剂，将光吸收、电荷分离和活性位点集成在氮化碳单一催化剂上实现了高效光催化制氢。为了调控单原子的种类和负载量我们发展了光诱导配体交换的方法合成了多种单原子光催化剂，以及双单原子光催化剂，并验证了双单原子之间的电子协同关系。进一步利用单原子催化剂在有机偶联反应上的应用。还发展了利用后修饰的方法合成一体化光催化剂，拓展了一体化光催化剂在有机反应方面的应用。

A06-04

光催化反应中的分子活化策略

关壬铨^{*1,2}、程雪莹²、孙涛²、刘春波²

1. 中国科学院半导体研究所
2. 吉林师范大学

光催化合成氨技术和光催化产过氧化氢技术的发展, 对于解决 21 世纪面临的能源危机问题具有重要意义。然而, 氮气分子和氧气分子的高效活化是这两项技术发展的巨大瓶颈。因此, 设计高效的分子活化策略实现氮气和氧气分子的高效活化, 将显著提高光催化合成氨和光催化产过氧化氢的效率, 对于这两项技术向实际应用迈进具有重要的推动作用。

针对氮氮三键难以活化的问题, 通过高压旋转剪切处理经典的锐钛矿相 TiO₂ 材料, 构筑同时具有缺陷与应变的锐钛矿-高压 II 相 TiO₂ 同质异相结, 以实现氮气的高效吸附和活化, 从而提升光催化合成氨效率。在此基础上, 通过在经典的共价有机框架材料 TpPa-1 的表面修饰具有高效电荷提取能力的 Nb₂C, 实现了 TpPa-1 的电子态重新分布, 使其发生局域电子富集。理论计算结合原位实验共同证实, 局域电子富集的 Nb₂C/TpPa-1 能够实现高效的氧气活化, 并产生稳定的*OOH 中间体, 使光催化产过氧化氢的效率提升 17 倍以上。这两部分研究为通过分子活化策略实现高效光催化反应提供了新的范例。

A06-05

碳点结构的调控及其在光催化制备过氧化氢中的应用

李鹏飞*

北京工业大学

过氧化氢 (H₂O₂) 作为当代最重要的化学品之一, 其需求量日益剧增。光催化产 H₂O₂ 因其绿色、安全、环保及可持续的特点, 成为一种极具前景的生产路线。然而, 当前光催化生产 H₂O₂ 的速率受限于光催化剂光响应范围窄、电荷分离效率低、活性位点不明确以及稳定性不足等问题, 远不能满足工业化生产需求。因此, 开发新型高效且稳定的光催化剂势在必行。碳点 (carbon dots, CDs) 作为一种新型碳纳米材料, 凭借其优异的光吸收能力、高稳定性及易于表面修饰等特性, 展现出成为优异光催化材料的巨大潜力。本研究基于对工业及生物体内 H₂O₂ 生成途径的分析, 通过对反应前驱体及中间体的调控, 成功构建了一系列具有明确光催化产 H₂O₂ 活性位点的 CDs。这些 CDs 均表现出良好的光催化产 H₂O₂ 活性。深入的机理研究揭示, 这类 CDs 在光催化过程中发挥着关键的质子传递作用, 从而在时间尺度上满足了高效、完整的光催化产 H₂O₂ 要求。基于上述 CDs 型光催化剂, 本研究进一步开发了平板通道式、雾化反应式及微纳气泡式等多种高效光反应器, 显著提升了光催化产 H₂O₂ 的速率。本工作不仅拓展了 CDs 作为新型光催化产 H₂O₂ 纳米材料的应用, 深入阐明了其作用机理, 而且开发了一系列高效光反应器, 有力推动了光催化制备 H₂O₂ 技术向工业化应用方向的发展。

A06-06

Creation of core-shell TiC-TiO₂ nanoparticles for visible-NIR-driven photocatalysis

Sujun Guan*, Xinwei Zhao

Henan University of Technology

TiO₂ photocatalysis has received much research interest, but the applications of TiO₂ nanoparticles (NPs) as photosensitizing agents in the attention should be paid to the last mentioned, but exceptional category containing metallic and treatment of cancer as well as in photodynamic inactivation of antibiotic-resistant bacteria. However, the large band gap of TiO₂ and fast recombination of photogenerated charge carriers limit its overall photocatalytic efficiency.

Presently, we had successfully enhanced the photocatalytic activity of TiO₂ coatings on Al₂O₃ balls, encompassing the increased surface accessible area with porous structure, narrowed band gap around 1.08 eV, and effect of charge transfer between TiC and TiO₂. Based on the current achievement, we had applied the above modification strategies into create the visible-NIR-driven core-shell TiC-TiO₂ NPs, via changing the "TiO₂ balls"

into the "TiC NPs", and further try to verify their potentials application in bio field.

A06-07

缺陷水滑石基纳米光催化固氮材料

张铁锐*

中国科学院理化技术研究所

光催化固氮作为一种有潜力的可持续固氮策略,有望在温和条件下实现氮气到含氮化合物的转化,为解决全球氮源需求和降低传统固氮能耗提供新途径。该技术实用化的关键之一是发展低成本、高效的光催化固氮材料。水滑石基纳米材料因组成结构易于调控、制备简便等优点而备受关注。近年,我们课题组通过在水滑石表面创造缺陷位等手段,实现了对反应物 N₂ 等吸附和活化的增强,进而显著提升了光催化固氮的效率。

A06-08

电荷分离策略实现聚集诱导发光材料到高效光催化剂的转化

谭华桥*、孙慧颖

东北师范大学

聚集诱导发光体(AIEgens)是一类含有非刚性共轭结构、依赖分子内运动受限实现聚集态发光增强的新型发光材料。基于 AIE 材料强大的光捕获和高效的光激发效率,如能将其光生载流子有效分离以此抑制辐射复合, AIE 材料将有望成为理想的光催化剂。以-C≡C-Cu-为基本构建单元的炔铜材料,利用铜和炔基配体在配位极化和多激发态路径上的优势,可加速光生电荷分离与传输,通过 AIEgens 与炔铜单元的协同作用,以及由多炔基配体构建的多通道电荷分离策略,我们实现了炔铜从聚集诱导发光材料到高效光催化剂的转化,这类材料在不同波长光照下展现可控的活性物种调控性能,因而对松油烯氧化展现波长依赖的产物选择性调控现象。该类光催化剂的开发为新一代智能光催化剂的开发提供了新的思路和启示,也加深了人们对炔铜光催化剂活性调控的理解。

A06-09

二维表面活性多样化的光/电催化应用

陈辛夷*、陈虹宇、程楚、吕苗

厦门大学

二维半导体材料具有丰富的活性位点和可调控的能带结构,在光化学和电化学领域有巨大的应用前景。其中,材料活性位点的能量特征及其精确调控是提升性能的关键因素,然而,受到材料固有热力学特性影响,制备过程中将不可避免地引入各类杂质、缺陷、表界面,成为额外活性位点,造成二维半导体表面活性多样化,不同活性位点对电子的消耗存在竞争性,如不能有效优化目标电子路径、钝化副反应,或诱导相邻活性协同,则无法高选择性地开启目标反应。与此同时,二维半导体在真实场景中的应用还会受到各类环境因素的影响。因此,高选择性开启目标反应和有效排除未知干扰是二维半导体材料实用化进程必须解决的问题。

本研究研究二维半导体材料多样化活性位点的能量特征,包括掺杂、缺陷、复合结构等局域态和表界面态,厘清各类位点的能量特征及电子行为,推测相邻位点的竞争与协同特性,以材料基本电子结构为出发点,通过微纳原位表征技术获得活性位点关键特征相关证据,开发针对性的数据提炼方法,提升二维半导体材料的光/电催化性能。

A06-10

Two-step preparation of cyano-functionalized linkage-hybrid covalent organic frameworks for efficient

H₂O₂ photosynthesis in air

Han Ren, Feng Luo*

East China University of Technology

Photocatalytic oxygen reduction reaction (ORR) with pure O₂ as feedstock is now recognizing as one of the most efficient alternatives for H₂O₂ generation. But, replacing pure O₂ by air often leads to sharp reduction in catalytic efficiency, thus seriously restricting its practical application, making photosynthesis of H₂O₂ through ORR in air a challenge issue. Here, we demonstrate a structural design on material to solve this challenge matter through preparing cyano-functionalized linkage-hybrid covalent organic frameworks (COFs) by means of a rational two-step synthetic pathway. The as-synthesized two COFs, namely ECUT-COF-95 and ECUT-COF-96, are found to enable efficient H₂O₂ photosynthesis with respectively H₂O₂ production rate of 2012 and 2575 μmol h⁻¹ g⁻¹ in open air and water without any sacrificial agent. More impressively, such value is even very close to that yielded under pure O₂ condition, rendering a benchmark O₂ utilisation and conversion efficiency (97%) for both of them. The photocatalytic mechanism in our system involves O₂-to-H₂O₂ ORR half-reaction coupling with H₂O-to-O₂ OER (oxygen evolution reaction) half-reaction, where the structure design of cyano-functionalized hybrid linkages benefits for enhancing the generation, transmission and separation efficiency of photogenerated carriers. The results highlight on the structural design of materials with cyano-functionalized hybrid linkages to access advanced photocatalytic performance with massive and real-time production of H₂O₂.

A06-11**In-situ exsolved ultrafine Ni nanoparticles from CeZrNiO₂ solid solution for efficient photothermal catalytic CO₂ reduction by CH₄**

Shaowen Wu*

Shandong University of Science and Technology

CO₂ reduction by CH₄ (CRM) to produce fuel is of great significance for solar energy storage and eliminating greenhouse gas. Herein, the catalyst of ultrafine Ni nanoparticles supported on CeZrNiO₂ solid solution (Ni@CZNO) was synthesized by the sol-gel method. High yield of H₂ and CO (58.0 and 69.8 mmol min⁻¹ g⁻¹) and excellent durability (50 h) were achieved by photothermal catalytic CRM merely under focused light irradiation. Structural characterization and DFT calculations reveal that CZNO has rich oxygen vacancies that can adsorb and activate CO₂ to produce reactive oxygen species. Oxygen species are transferred to ultrafine Ni nanoparticles through the rich Ni-CZNO interface to accelerate carbon oxidation, thereby maintaining the excellent catalytic stability of the catalyst. Moreover, the experimental results reveal that light irradiation can not only enhance the photothermal catalytic CRM activity through photothermal conversion and molecular activation, but also improve the stability by increasing the concentration of oxygen vacancies and inhibiting CO disproportionation.

A06-12**Construction of cationic covalent organic framework for efficient gold extraction**Yequan Jiang¹, Jianqiang Li^{*1,2}

1. East China University of Technology

2. Jiang Xi Zheng Pu Yi He Technology Co. Ltd.

This work reports the synthesis of a novel ionic covalent organic framework, ECUT-ICOF-5, via a Knoevenagel reaction using the ionic liquid monomer 2-chloro-1,3-dimethylimidazolium tetrafluoroborate (CIB). Characterized by high crystallinity (hexagonal, P6 space group), significant porosity (BET surface area =

1019 m²g), and excellent optoelectronic properties (optical band gap = 1.74 eV), ECUT-ICOF-5 demonstrates exceptional potential for gold extraction. Under visible-light irradiation, it achieves near-complete ($\approx 100\%$) extraction efficiency from NaAuCl₄ solution within 1 hour, with an extraordinarily high extraction capacity of 3260 mg/g, surpassing most reported materials. It exhibits excellent selectivity for gold over competing cations (e.g., Al³⁺, Cu²⁺, Cd²⁺) and anions (except CO₃²⁻), maintains performance over at least six adsorption-desorption cycles using HCl/thiourea eluent, and shows high chemical stability. The light-driven process facilitates the photocatalytic reduction of Au³⁺ to metallic Au⁰, significantly enhancing extraction compared to dark conditions.

A06-13

Gas phase immobilization of nickel phthalocyanine on single-wall carbon nanotube films for CO₂ reduction

Zhongqiang Ni, Pengxiang Hou, Chang Liu*

Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences

The conversion of CO₂ into fuels or value-added chemicals via electrochemical CO₂ reduction reaction (CO₂RR) is a promising route to mitigate energy crises and address environmental challenges. Molecular catalysts have garnered substantial attention due to their well-defined active sites and tailorable structures. However, their poor electrical conductivity and tendency in aggregation compromise current density and long-term stability. Herein, we report a porous electrode composed of nickel phthalocyanine (NiPc) molecules anchored on free-standing single-wall carbon nanotube (SWCNT) films for efficient and selective CO₂-to-CO conversion. SWCNT films with high conductivity and large surface area were prepared by a floating catalysts chemical vapor deposition method. NiPc molecules were anchored on SWCNT films by a facile gas-phase immobilization strategy without any liquid-phase processing, preserving the porous, flexible, and self-supported structure of SWCNT films. The as-prepared NiPc/SWCNT hybrid films have a robust, highly porous architecture and can be directly used as binder-free electrodes for the reduction of CO₂ to CO. The network of SWCNT films not only provide fast electron transport channels, but also effectively prevent the NiPc molecules from aggregation. As a result, the NiPc/SWCNT film catalyst shows excellent activity and selectivity for CO₂-to-CO conversion, achieving a maximum Faradaic efficiency (FE) of 98.9% at -0.8V vs. RHE.

A06-14

基于光能转换反应步骤去中心化原则的低维纳米光（电）催化材料设计策略

邢政*

中山大学

太阳能是可再生能源，取之不尽、分布广泛，其利用过程中几乎不排放温室气体和污染物，基于各种光能转换技术实现太阳能的有效利用是实现能源转型、环境保护和可持续发展的重要途径。近年来，基于纳米材料的光（电）催化、光电化学阴极保护等技术受到广泛关注，其将光能转换为化学能，从而达到清洁燃料或化学品的绿色合成、污染物的有效去除、金属防腐等目的，尤其是低维光（电）催化材料（1D 纳米线、2D 纳米片等）展现了优异的光活性。这些“光能-化学能”转换系统的工作过程基本由三个反应步骤组成：（1）“光吸收/激发”，即 TiO₂ 等半导体被光子激发后发生电子跃迁、产生“电子-空穴”对，（2）“电荷的分离与选择性迁移”，即激发态的电子和空穴在分离后穿越半导体颗粒（或其组成的电极）到达催化剂与反应介质的界面处，（3）“界面 redox 反应”，即到达“催化剂-反应介质”界面处的激发态电荷参与 redox 反应。在过去的研究中，针对低维材料的调控往往仅能优化某一个或两个反应步骤，难以保证光能转换系统的三大核心反应步骤均顺利发生。本课题组通过低维光（电）催化材料的理性复合将“光激发”、“光生电荷的定向分离”与“界面 redox 反应”去中心化，使得不同的反应步骤以更高的效率在不同纳米材料进行，从而实现更高的光能转换效率，取得了丰富的研究成果。研究发现，在去中心化设计的低维纳米复合光（电）催化材料中，材料界面结构、能带结构匹配、半导体的铁电性等因素对于电荷分离、表面反应等过程有着

决定性影响，理性设计的光（电）催化材料展现了显著提高的制氢活性、高附加值有机物产率以及金属保护效能。

A06-15

基于小球藻的可调多级结构微球制造及其光电催化性能探究

周慧、蔡军*

北京航空航天大学

基于微生物模板的生物成形技术制造微纳米功能颗粒、结构、材料，已经成为国际热点研究方向。本研究以小球藻为生物模板，全面分析模板表面多级结构精准调控的条件，系统比较不同工艺条件，得到了一种类病毒状小球藻基磁性 ZnO 核壳微球。进一步探究具有不同 ZnO 形态外壳的微球的性能变化。结合良好排布的 3D ZnO 纳米棒阵列、Fe₃O₄ 与 ZnO 异质结以及小球藻的宽范围光吸收性的优势，此形貌可调的多级结构微球具有优异的光吸收能力和光电催化活性，具有优异的污染物去除效率。经过极端条件测试，仍保持良好的化学稳定性和机械耐久性。这种通用性和简便的制造策略可以扩展到其他微生物，为各种多级结构微纳米材料的设计及应用提供新思路。

A06-16

二氧化碳催化转化新过程

曾杰*

安徽工业大学/中国科学技术大学

曾杰教授聚焦 CO₂ 催化转化研究，在催化剂开发、反应器升级和反应路径设计方面取得系列进展。创制出 Pb₁/Cu 等催化剂，将 CO₂ 高效转化为甲酸等高值化学品。提出“纳米岛”策略，实现高稳定性单原子、团簇催化剂的有效构筑。通过固态电解质反应器设计，实现 CO₂ 到甲酸、乙酸等不含电解质、免分离高纯化学品的连续制备。开辟出“电-生物耦合催化”制备食品、药品分子新途径，将 CO₂ 和水转化为高阶食品分子葡萄糖和脂肪酸，将丙酮和水转化为高阶药品分子番茄红素和对香豆酸。同时，提出“等离子体-电化学级联催化”新模式，以 N₂ 和水为原料合成羟胺。

A06-17

软晶格中间体介导合成一维纳米晶

李毅*

合肥工业大学

一维半导体纳米晶兼具了零维量子点与三维体材料的优势，在光电功能应用领域具有重要的应用前景。近年来，报告人聚焦一维半导体纳米晶的精准合成与激发态调控，侧重探索在近原子尺度实现材料精准化学合成的新原理、新方法及其激发态调控的新机制，以指导一维纳米晶的定向设计与功能应用。主要成果包括：（1）基于软晶格固体化学原理，发展了晶种诱导催化生长与自限制化学转化新方法，实现了一维纳米晶的近原子尺度精准制备；（2）建立了一维纳米晶微观结构与激发态之间的相互关系，揭示了基于量子限域效应的载流子动力学调控新机制，实现了高效光电化学转化应用，提出了基于局域磁诱导效应的手性构建新思路，为自旋调控及应用开辟了新途径。

A06-18

自然光热碳一催化研究与应用

李亚光*

河北大学

以二氧化碳 (CO_2)、一氧化碳 (CO)、甲酸、甲烷等碳一分子为基础的光热碳一催化, 在太阳光驱动高值化学品生产、 CO_2 减排等领域起到关键作用。围绕光热碳一催化需要强光辐照、产物纯度低、难以稳定运行的核心挑战, 我们提出选择吸光和异质结构原理降低光热材料热辐射、提升辐照温度, 使得光热材料的标准太阳光辐照温度超过到 $350\text{ }^\circ\text{C}$, 实现自然光热碳一催化运行; 通过理论计算发现萤石氧化锆表面致密晶格氧能够静电排斥甲酸脱氢反应中间体、阻断甲酸制氢路径, 降低甲酸制 CO 能垒; 开发爆炸法制备亚稳相纯净萤石氧化锆, 结合新型光热器件实现了自然光热甲酸裂解直接制备高纯 CO ; 提出多金属元素均相化的高熵策略抑制光热 CO_2 加氢催化剂的烧结失活, 通过多组元均相固溶化开发低温 CO_2 加氢催化剂, 实现了昼夜持续运行的自然光热 CO_2 甲烷化; 构建了光热 CO_2 加氢与光伏电解水制氢耦合的自然光驱动人工光合作用体系, 实现了 103 m^2 的室外示范、公斤级的绿色 C1 物质生产和 17% 的太阳能-化学能转换效率。

A06-19

低维铜基硫化物调控合成及光热智能应用

苏梦瑶、仵雅禾、张加涛*

北京理工大学

面对能量转换与智能仿生医用的交叉需求, 高能效转化体系的创新研发已成为多学科融合领域的前沿课题。光热转换技术因其非介入式操作优势与多级能量转化特性 (光能 \rightarrow 热能 \rightarrow 化学能/机械能), 被视为可实现高效能量利用的重要突破口。为了提高光能的利用效率, 材料的选择与纳米结构的巧妙设计成为决定性能的关键因素。铜基硫化物纳米材料凭借其可调谐局域表面等离子共振与独特的载流子动力学特性, 在宽光谱响应与高光热转化效率方面展现出显著优势。然而, 其精确可控构筑策略与性能优化机制尚不明确, 仍面临光热转化效率较低、合成过程复杂、稳定性差以及可持续性不足等挑战, 制约着该材料体系的理论突破与工程应用。因此, 如何利用光热弛豫动力学机制开发高效光热材料和探索光热转换效率的理论极限仍然存在较大挑战性。本论文针对铜基硫化物近红外光热转换材料的可控制备、弛豫动力学及智能应用展开研究: 利用化学热力学驱动的热注入反应实现铜基硫化物纳米晶体族的调控制备, 通过等离子共振及非辐射弛豫动力学机制, 阐述了铜基硫化物中晶体结构-载流子动力学-光热功能的构效关系, 进一步开发了具有超高光热性能的原级二维硫化铜纳米晶, 通过独特的晶型与结构性质促进热电子与热空穴的高效产生、复合与利用, 提高原级铜基硫化物光热剂的光能-热能-机械能转化效率, 增强了在深层大脑血管光声成像和智能操控仿生机器人中的应用。

A06-20

稀土 LaB6 纳米粉体的制备及性能研究

赵瑞山^{*1,2}、袁铁锤¹、马小波²、王志坚²

1. 中南大学 粉末冶金研究院

2. 湖南稀土金属材料研究院有限责任公司 稀土功能材料湖南省重点实验室

采用钙热还原-酸浸法 (CTR & AL) 合成制备了 LaB6 纳米粉体, 研究了粉体制备的关键工艺条件, 进一步合成制备 La_{1-x}Ca_xB₆ 及 La_{1-x}Eu_xB₆ 纳米粉体, 系统研究了 Ca/Eu 掺杂对 LaB6 结构、光学性能的影响规律及作用机理。XRD、FE-SEM 及 TEM 分析结果确认纳米 Ca/Eu 掺杂 LaB6 均为 CsCl 型简单立方单相结构, 粉体结晶性良好, 颗粒呈近立方形貌, 平均晶粒尺度为 45 nm 。光吸收结果表明随着 Ca/Eu 含量的增加, 纳米 La_{1-x}(Ca/Eu)_xB₆ 透射光波长逐渐增大, 产生“红移”现象, 且 Eu 掺杂引起 LaB6 近红外区吸收光谱的增强与展宽。第一性原理计算结果揭示了 Ca/Eu 掺杂引起 LaB6 近费米能级能带局域性加强, 导带中的传导电子数量减少, 进而导致其等离子共振频率能量降低, 定性解释了纳米 La_{1-x}(Ca/Eu)_xB₆ 透射光波长连续可调谐性, 是优异的光学应用候选材料。

A06-21**Nanomaterials 期刊介绍**

马林*

曼迪匹艾（武汉）科技服务有限公司

Nanomaterials 期刊是一本开放获取的同行评审期刊，于 2010 年创刊。期刊主题涵盖纳米材料(纳米粒子、薄膜、涂层、有机/无机纳米复合材料、量子点、石墨烯、碳纳米管等)、纳米技术(合成、表征、模拟等)以及纳米材料在各个领域的应用(生物医药、能源、环境、电子信息等)等，主要发表原创性论文及综述。目前被 SCIE(Web of Science), Scopus, PubMed, PMC, CAPlus / SciFinder, Inspec 等数据库收录。期刊 2023 年影响因子为 4.4, CiteScore 为 8.5。Nanomaterials 期刊力求为 Nanomaterials&Nanotechnology 相关领域学者提供一个快速、高质量的开放获取出版平台。稿件通过同行评议，从收到投稿到向作者提供初步评审决定大概 14 天，从投稿到发表的平均处理周期约为 35 天。

A06-22**阴离子交换膜燃料电池催化基础探讨**

胡劲松*

中国科学院化学研究所

碳中和愿景下氢能将成为未来终端能源的重要组成部分。燃料电池是清洁、高效利用氢能的重要途径之一，也是实现交通运输行业零碳化的重要技术。阴离子交换膜燃料电池（AEMFC）具有不依赖贵金属、催化剂与组件成本低、氧还原反应动力学快、水管理简化等诸多优点，但其应用瓶颈之一是仍缺乏高活性、长寿命的催化剂。本报告将着重探讨 AEMFC 催化剂开发与催化层构筑方面目前仍面临的挑战与难题，结合报告人在燃料电池催化剂基础研究领域的实例，探讨低成本、高性能非贵金属 AEMFC 电催化剂的设计与可控构筑，以及 AEMFC 催化层与膜电极性能提升目前仍存在的挑战与可能的发展机遇。

A06-23**限域能源电催化材料**

张震*

西北工业大学

能源小分子催化转化是重要的可再生能源利用途径，限域电催化材料在能源小分子催化转化中具有关键作用，能够有效调控相互耦合的物质传递和电荷转移过程以及催化表界面微环境，实现高效、稳定、选择性的物质转化与能量传递，为构筑高性能电催化材料提供了范式。然而，限域电催化材料所面临的关键难题包括难设计既能提供坚固稳定限域环境又能促进电荷与物质传输的限域载体、难调控限域空间局域催化环境、难构筑原子尺度限域催化活性中心。针对上述问题，报告人围绕功能限域载体、多级限域结构、原子级限域活性中心三方面展开了创新性研究：（1）创制了导电沸石分子筛电催化剂载体，发展了载体动态调控限域金属结构新策略，实现了限域载体对催化性能动态调制；（2）提出了新型纳米限域双金属结构构筑方法，实现了纳米孔内局域微环境精准调控，解决了催化活性、稳定性和选择性难以兼顾问题；（3）构筑了原子尺度限域催化活性区，建立了限域活性区内多位点精准协同调控新方法，突破了限域空间内孤立位点活性不足的瓶颈。

A06-24**NiFe 基电催化剂的固相-分子催化剂协同产氧作用机制**

蒯春光*

武汉大学

氧析出反应(OER)是众多能源存储与转换系统的关键过程,然而传统单活性位点固体催化剂受限于中间产物吸附能的线性标度关系,其反应动力学提升仍面临重大挑战。本研究报道了 NiFe 基氢氧化物电催化剂上的一种固相-分子协同产氧机制。通过一系列原位表征手段,对固-液相界面的关键物种进行鉴定与动力学分析,我们发现反应过程中溶解在液相的 FeO_4^{2-} 分子物种可作为助催化剂,与固相活性位点协同参与 O-O 键形成步骤。这种固相-液相协同机制可规避纯固体催化剂的线性标度限制。该研究不仅揭示了一种调控固液界面电催化的非传统固相-分子催化剂协同作用机制,更为突破线性标度关系限制的多位点协同催化策略提供了新思路。

A06-25

引入氢键以构建具有高 OER 活性和超长稳定性的导电 π -d 共轭 MOFs

邢丹宁*

山东高等技术研究院

导电 π -d 共轭金属有机框架 (MOFs) 材料因其固有的高导电性在电催化领域引起了广泛关注。然而,较差的电催化稳定性仍是阻碍 MOFs 材料实际应用的主要问题。本文报道了一种增强 MOFs 基电催化剂稳定性的新策略——引入氢键 (H 键)。值得注意的是, π -d 共轭 MOF 材料 $\text{FeCo}_3(\text{DDA})_2$ (DDA = 1,5-二氨基-4,8-二羟基-9,10-蒽二酮) 展现出超高的电催化析氧反应 (OER) 稳定性 (可达 2000 小时)。实验研究表明, $\text{FeCo}_3(\text{DDA})_2$ 中氢键的存在是其具有超高 OER 稳定性的关键原因。此外,该材料还表现出优异的 OER 活性 (在 10 mA cm^{-2} 的电流密度下,其过电位为 260 mV,塔菲尔斜率为 $46.86 \text{ mV dec}^{-1}$)。密度泛函理论 (DFT) 计算进一步表明, $\text{FeCo}_3(\text{DDA})_2$ 中 Fe 和 Co 位点的协同效应是其优异 OER 性能的根本。这项工作为提升导电 π -d 共轭 MOFs 的电催化稳定性开辟了新途径。(本工作发表于 Adv. Mater. 2024, 2402388)

A06-26

外磁场在电催化 CO_2 还原中的磁畴诱导与分子机理

魏仕林、刘伟琪、白沛瑶、杨闯闯、孔晓、徐朗*

中国矿业大学

在电驱动的化学反应中引入磁场梯度,有望揭示更多未知的科学现象与机制。本工作详细阐述了依托于镍基磁性材料的 CO_2 还原反应在外部磁场作用下的电催化活性 (从磁矩排列的角度) 和选择性 (从分子水平的角度) 作用机制。在电催化活性方面,外加磁场能够扩大催化电流和充电电流,磁场强度越强,电流密度增量越大。此外,磁场强度的增强会导致磁矩的长程有序化,从而降低传导电子的散射和电荷转移电阻。通过磁场梯度的施加,发现了一种有趣的磁增益现象:在大电势下才能获得的电流密度,可以通过在小电势下施加外部磁场来实现,从而大大降低了能耗。针对性设计的配备磁场的原位红外光谱设备成功捕捉到了分子结构在磁场作用下的微妙变化。这解决了在应用磁场时难以获取关键中间体分子结构变化的难题,从而能够阐明磁场在分子水平上影响催化选择性的内在机制。在选择性方面,外部磁场能够调节活性位点和反应物之间的电荷分布,从而对关键中间体 $^*\text{COOH}$ 的分子结构产生微小的扰动。这种微小的变化反过来又会影响电催化 CO_2 还原反应决速步的能垒,从而促进 FEco 的增加。因此,本工作中介绍的方法和结果为电催化 CO_2 还原研究提供了新的视角,并从机理上深入揭示了外部磁场如何影响电催化反应的内在机制。

A06-27

原子级位点催化剂表界面调控及电催化性能研究

赵娣

北京理工大学化学与化工学院

为了缓解能源危机和环境污染问题,越来越多的国家将“碳中和”上升为国家战略。面向这一问题,

报告人以实现国家“双碳”大目标为背景，利用电、光等新能源方式实现氢能的制取、利用和实现温室气体 CO₂ 有价值化学品转化，从而提高未来碳中和体系中可再生能源的利用率。具体以纳米、团簇、单原子新型催化剂的设计为主要目标，以原子、分子尺度表界面调控合成为切入点，探究其 H₂、O₂、CO₂ 小分子参与的燃料电池、电解水、CO₂ 电还原等新能源方向的基础应用研究。

A06-28

Electrocatalysts Design for 2e⁻ Oxygen Reduction Reaction

Xiaolei Wang*

University of Alberta

Electrochemical production of hydrogen peroxide (H₂O₂) via 2-electron oxygen reduction reaction (ORR) offers a promising approach for sustainable decentralized production of H₂O₂. However, ORR goes through either 4-electron pathway to water or 2-electron pathway to H₂O₂. The need for controllable modulation of ORR pathways, as well as the kinetic challenges, calls for the discovery and optimization of efficient catalysis. Herein, we focus on various design strategies of electrocatalyst towards 2-electron ORR, including (i) developing advanced electrocatalysts with high activity and selectivity for both alkaline and acidic application media; (ii) elaborating ex-situ and in-situ characterization of electrocatalyst structure and electrochemical investigation; (iii) revealing the underlying factors that contribute to the high performance and providing guidance for future design; (iv) building up the gap between lab screening and practical application to facilitate its commercial utilization. Electrocatalysts were designed for alkaline electrolyte. A promising carbon-based catalyst, consisting of oxygen rich hollow mesoporous carbon spheres (HMCS) was developed, exhibiting high onset potential (0.82 V) and halfwave potential (0.76 V) as well as excellent H₂O₂ selectivity (above 95%). A series of HMCS were further developed for the investigation of porosity engineering on the performance. Electrocatalysts were designed for acidic media. A series of Au@Pd core@shell structures were developed to investigate the influence of Pd 4d orbital overlapping degree on 2e⁻ ORR performance. Au@Pd NWs with Pd₄ with oxygen coverage causes electron redistribution and weakened *OOH binding strength on active sites, leading to enhanced activity of Pd₄ with only 0.06 V overpotential in acidic media. The influence of local coordination environment (LCE) manipulation was also studied. We underscore the influence of LCE on directing the 2e⁻ ORR, utilizing Pd cluster as a model catalyst.

A06-29

高效光电极的混合微波退火合成

张和民*

四川大学

太阳能光电催化分解水制氢、还原硝酸盐/氮气制氨或将二氧化碳转化为碳氢燃料等可有效缓解人类对可再生能源的需求，是实现“碳中和、碳达峰”的理想途径。目前还没有一种光电材料能够满足所有的条件（高效、稳定、价廉）。探索新材料、新结构、以及新的制备技术是实现太阳能高效转换和利用的关键。在导电玻璃基底上制备同时具有纳米结构和高结晶性的光电极材料仍然是一个很大的挑战^[1]。一方面，高结晶性可以减少晶界和缺陷，有利于光生电子/空穴的分离、传输；另一方面，纳米结构化增大了电解液的接触面积，同时缩短了光生电子/空穴的传输距离。然而，高结晶性材料需要长时间的高温退火合成，通常会造成纳米结构的破坏。

混合微波退火（Hybrid microwave annealing, HMA）有效耦合了常规加热和微波加热，是一种独特高效的加热方法。我们发展了 HMA 在光电催化方面的多个应用：1）“HMA 诱导固相界面反应”构筑了合成条件苛刻的氧化铁新型异质结材料，增强了光电催化性能；2）“HMA 合成梯度掺杂芯-壳同质结”的光电极，发挥掺杂优势的同时解决了过多表面缺陷和更高过电位的问题；3）HMA 高效修复/激活氮离子植入的二氧化

化钛电极,提高了光电催化性能;4)基于原位掺杂和 HMA 诱导固相界面反应构筑高结晶性 p-t-n 异质结,有效提升氧化铁分解水性能;5) HMA 在 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 纳米棒表面合成了非晶 HfO_x 的空穴存储层;7) HMA 诱导稀土 Eu、过渡金属 Nb 共掺杂赤铁矿光阳极,提升光电流密度的同时降低起始电位;8) HMA 诱导 Sb 掺杂氧化铁 p-n 同质结叠层光阳极实现其近理论转化效率;9) HMA 诱导氧化钴覆盖层与氧化铌阻挡层,合成了多孔氧化铁纳米棒光阳极。HMA 为高效光电极材料的制备、异/同质结的构筑和新型半导体材料的合成提供了新的技术平台。

A06-30

电合成氨催化材料设计与界面调控

万宇驰¹、张久俊*¹、吕瑞涛²

1. 福州大学
2. 清华大学

氨是一种大宗化工产品,其年产量已突破 2 亿吨,在农业、工业以及制药业等领域具有重要的应用价值。目前,工业合成氨依赖于高温、高压等严苛反应条件,不仅能耗巨大,且 CO_2 排放量高,对生态环境和社会可持续发展造成严重影响。电催化工艺可以通过耦合可再生能源实现氨的清洁生产,是前沿领域的研究热点。然而,电合成氨涉及多步基元反应,反应中间产物繁多,反应动力学较为缓慢,需要较高的过电位,导致产氨综合能耗较高;此外,副反应较多,导致电合成氨反应选择性较低。为了提升电合成氨综合性能,报告人聚焦于催化材料设计与界面调控。基于电催化产氨反应机理的解析以及碳载金属电子结构的调控,设计了碳载异质结构量子点催化材料,揭示了纳米碳载体在分散双活性中心、调控催化材料尺寸方面发挥的关键作用,进一步优化碳载体与金属之间的相互作用以增强催化材料的稳定性;通过调控催化材料表面与水分子之间的相互作用,促进界面水的活化与解离,为加氢反应步骤提供活性氢,加速电合成氨反应动力学。

A06-31

纳米笼限域热解策略调控电催化剂多级结构提升膜电解水性能

王美玲*

太原理工大学

设计高性能电化学纳米材料是实现能源转型与双碳目标的关键路径。负载型金属基纳米材料由于与载体界面结合力弱,易导致团聚或脱落,严重制约实际应用。针对这一难题,提出纳米“笼”限域策略,通过空间限域效应与限域热解过程协同调控金属基纳米材料的多维结构,突破电化学活性提升难题。围绕“限域型金属基纳米功能材料设计与性能优化”核心目标,1)发现“纳米笼限域激活多金属氧酸盐(多酸)本征活性”新现象,建立了纳米“笼”限域多酸新方法,揭示了纳米“笼”限域激活多酸本征活性机制,形成了较为完整的“纳米笼限域激活多酸本征活性”理论体系;2)构建了“纳米笼限域热解”策略,实现了金属基纳米材料跨尺度与相界结构调控,解决了纳米材料电解水本征活性低的难题,揭示了跨尺度金属基纳米材料电催化反应规律与过渡金属碳化物有序相界调控机制,丰富了“限域催化”理论。

A06-32

金属间化合物的相工程及电催化应用

韵勤柏*

香港科技大学(广州)

金属间化合物(IMC)因其明确的活性位点构型和良好的结构稳定性被视为优异的催化剂。然而,如何针对特定催化反应精细设计 IMC 的活性位点结构仍具有极大挑战。对此,我们提出了基于相工程精准制备 IMC 纳米催化剂,实现了其活性位点构型及电子结构的精细调控,提高了其在多种电催化反应中的性能。

发展了不同晶相 Ga 基 IMC 的高温退火通用制备方法, 针对电催化硝酸根还原反应构建了具有优异性能的体心立方晶相 CoGa IMC。开发了 IMC 的湿化学精细制备策略, 实现了面心四方晶相 Pd 基 IMC 纳米片的可控制备, 利用晶相与形貌的协同调控提高了其乙醇氧化性能。提出了引入无定形相丰富 IMC 活性位点的思路, 通过构建无定形/IMC 异相界面优化了 PtPbBi 纳米片的电子结构和对中间产物的吸附能, 实现了高效电催化醇氧化和析氢。此外, 利用外延生长法实现了亚稳相 Pd-Bi IMC 的可控制备, 阐明了构建亚稳相 Pd 基催化剂乙醇氧化性能的提升机制。以上工作为精细调控 IMC 原子排布、构建高性能催化剂提供了新策略。

A06-33

MXene 基异质结构催化剂的设计及其电催化合成氨性能研究

崔志杰、刘加朋*

河北工业大学

氨作为一种无碳富氢化合物, 被认为是一种新兴的可再生能源。目前, 氨的大规模生产主要依靠 Haber-Bosch 工艺, 极端的工业条件导致大量的 CO₂ 排放和能源消耗。因此, 有必要探索一种可持续的氨生产技术。电催化硝酸还原反应(NO₃RR)可以将硝酸盐污染物转化为具有较高附加值的氨。然而, 由于 NO₃RR 涉及复杂的多电子反应, 迫切需要开发高效的电催化剂。本文采用融盐刻蚀和电置换相结合的方法合成了负载在 Ti₃C₂T_x 的 CoCu Janus 纳米颗粒(CoCu-Ti₃C₂T_x)。串联催化效应可以维持含氮中间体和活性氢(H_{ads})之间的平衡, 提高 NO₃RR 的反应动力学。另外, 用 CoCu-Ti₃C₂T_x 组装的 Zn-NO₃⁻ 电池的功率密度为 10.33 mW cm⁻², 能够同时实现硝酸盐的去除, 氨的合成和能源供应。结合验证实验和密度泛函理论计算, 揭示了 CoCu-Ti₃C₂T_x 的反应路径和串联催化机理。

A06-34

高分子介导氧还原电催化剂及其锌空电池

袁凯*

南昌大学

空气电极氧还原反应(ORR)电催化剂性能是决定锌空电池器件能效的关键因素, 目前商业化铂基催化剂的稀缺储量严重阻碍了器件大规模应用。过渡金属单原子催化材料具有高的 ORR 催化活性, 但要走向实际应用, 其 ORR 性能还有待进一步提升。采用异质原子掺杂、纳米聚集体诱导、不对称配位、轴向配位等策略, 有效调控活性位点电子结构和几何结构等微环境, 优化氧中间体的吸附, 显著提升 ORR 催化性能。采用卟啉、酞菁等构筑单元, 通过自下而上的化学合成方法, 精准设计合成具有结构明确的催化剂, 可为研究催化剂结构和性能之间的关系提供新思路, 为高性能催化剂的设计提供指导。

A06-35

纳米 MOF 电催化合成过氧化氢

刘超*、余承忠

华东师范大学

作为一种通用且环境友好的氧化剂, 过氧化氢(H₂O₂)的制备合成是环境、能源、工业和医药等相关领域的重要课题。以 O₂ 或 H₂O 为原料, 电为能量输入的电催化策略是新兴的 H₂O₂ 制备技术, 具有绿色安全、经济高效等优点。金属有机框架(MOF)的大比表面积和高孔隙率有利于小分子及产物的快速吸附和扩散, 高分散且结构明确的金属中心可作为催化反应位点, 是一类极具潜力的 H₂O₂ 合成电催化剂。然而, 现有 MOF 电催化剂仍存在选择性和活性差, H₂O₂ 产率低等问题, 如何理性设计 MOF 材料活性中心的配位环境和电子态, 以定向调控 O₂ 或 H₂O 的转化路径及机制仍存在重要挑战。鉴于此, 我们以纳米金属有机框架(MOF)及其他功能物种为结构基元, 发展多种新型界面组装及转化策略用于纳米 MOF 复合及衍

生材料的定向合成；基于纳米 MOF 基材料的精细结构设计，揭示了界面活性电子态、d 带中心工程、晶面效应、配位溶剂效应及配体效应等对电催化 2e⁻氧还原及水氧化反应的调控机制，显著提升了 H₂O₂ 的选择性及产率，为高价值化学品的高效绿色合成提供了理论支撑。

A06-36

锂-二氧化碳电池 MXene 基催化剂性能研究

刘欢*

西安科技大学

锂-二氧化碳 (Li-CO₂) 电池以 CO₂ 作为能源载体，兼具 CO₂ 转化利用和能量存储的双重功能，且其理论能量密度高达 1876 Wh kg⁻¹，近年来引起了科研工作者的广泛关注。然而，CO₂ 反应动力学缓慢，放电产物难以完全分解，导致 Li-CO₂ 电池存在过电位高、可逆性差和能效低等问题，严重限制了其实际应用。因此，亟需设计高效的正极催化材料，以加速 CO₂ 的氧化还原反应动力学并促进放电产物的分解。二维过渡金属碳/氮/碳氮化物 (MXene) 因其高导电性、高比表面积、可调控的层状结构和较高的 CO₂ 活化能力，被认为是 Li-CO₂ 电池的有效正极催化材料。然而，MXene 基正极催化剂的电化学性能仍有很大的提升空间，且其结构、组成与电化学性能之间的影响关系尚不明确。基于此，我们针对锂-二氧化碳电池反应动力学缓慢和产物分解困难等问题，开发了四种高效 MXene 基正极催化材料，并阐明了其构效关系。通过表面氧化策略构建的 MoO₂@Mo₂C 异质结构，在 500 mA g⁻¹ 大电流下实现 230 次稳定循环（首次充电过电位 0.8 V）。利用 -Cl 端基与 Zn 协同调控的 Zn-Ti₃C₂Cl₂ 材料，使电池获得 18,529.7 mA h g⁻¹ 放电容量和 1500 小时循环寿命。基于单原子策略制备的 MX-RuSA 催化剂显著降低分解能垒，实现 0.56 V 低过电位和 3000 小时超长循环。创新设计的 Mo_{1.33}C@rGO 自支撑电极通过调控放电产物为易分解的 Li₂C₂O₄，获得 0.46 V 超低过电位和 330 次循环稳定性，并成功构建柔性器件驱动 LED。研究为高效 Li-CO₂ 电池开发提供了新思路。

A06-37

原子级催化位点精准调控及电催化氧反应机制研究

陈长利*

齐鲁工业大学

本研究聚焦原子级催化位点的精准设计与动态调控，通过先进的合成策略（如缺陷工程、配体场调控、双原子位点构建）实现对金属中心电子结构、几何构型及反应微环境的精确优化。结合同步辐射、原位光谱和理论计算，系统探究了活性位点在电催化氧反应中的动态演化机制，揭示了关键中间体（如 OOH、O、*OH）的吸附-脱附行为与催化性能的关联规律。研究发现，通过调控金属-氮-碳载体中金属的 d 带中心或引入第二配位层杂原子（如 S、P），可优化氧物种的吸附能，打破线性关系限制，显著提升本征活性。此外，针对双原子位点协同催化机制，阐明了金属间电子耦合对 O-O 键断裂/形成的促进作用，为设计高效双功能催化剂提供了新思路。本研究的创新点在于：（1）发展了原子级催化位点的精准合成方法学；（2）建立了动态反应条件下活性中心结构与性能的构效模型；（3）提出了多尺度调控策略以协同优化传质与电荷转移效率。研究成果不仅深化了对电催化氧反应机制的认识，还为下一代高性能催化剂的理性设计提供了理论依据和技术支撑。

A06-38

单原子催化剂界面结构调控及电催化应用

尚会姗*

郑州大学

随着全球能源危机加剧与环境污染问题的日益严峻，发展燃料电池、金属-空气电池等可持续清洁能源

技术已成为当务之急。作为这些能源转换装置的核心环节，氧还原反应（ORR）因其固有的高能垒特性，严重制约了能量存储/转换系统的实际应用效率。当前，贵金属铂基催化剂虽占据主流应用地位，但其稀缺性和高昂成本严重制约了大规模应用。在此背景下，开发具有资源丰富性及高本征活性的新型 ORR 催化剂对推动能源技术革新具有关键意义。

近年来，单原子催化剂凭借其独特的原子级分散特性及超高原子利用率，已成为多相催化领域的研究热点。值得注意的是，传统单原子催化剂普遍采用的对称性金属-N4 配位构型，往往难以实现 ORR 反应中间体的最优吸附平衡。研究表明，通过引入硼、氧、磷、硫、硒等非金属杂原子构建非对称配位环境，可有效诱导活性位点的电荷重分布，进而调控金属中心电子能级并优化轨道耦合效应。基于此研究思路，本课题组基于前期研究基础，成功构建了具有非对称配位结构的单/双原子催化剂，该材料在碱性介质中展现出卓越的 ORR 催化性能。

A06-39

高活性高稳定性 CuCoNi 层状复合金属氢氧化物的电催化硝酸根还原性能研究

王德军*

山东科技大学

电催化硝酸盐还原（ NO_3^- RR）技术因其实用性而成为氨生产的热点，当今时代需要构建一系列具有高活性和稳定性的先进电催化剂。在过去的十年中，过渡金属氧化物和氢氧化物由于其适中的活性、结构稳定性和容易制备而被开发用于催化 NO_3^- RR。其中，层状复合金属氢氧化物（LDHs）具有独特的层状结构、大的层间距离和高度可调的组成作为用于 NO_3^- RR 的新型电催化剂引起了极大的关注。本文以金属有机骨架材料（ZIF-67）为前驱体，采用室温搅拌法合成的 CuCoNi-LDH 纳米笼在 NH_3 生产方面表现出显著的电活性，因为纳米笼的中空结构诱导了质量传递，而纳米笼的微结构特征赋予了纳米笼更多暴露的活性位点，且具有大量的催化中心和有利的 d 带结构，从而有更快的 $^*\text{NO}_3^-$ -至- $^*\text{NO}_2^-$ 催化动力学进而促进了 NO_3^- RR 活性的增强。其中 CuNi 比为 1: 1 的 CuCoNi-LDH 纳米笼在 -0.8V 电位下具有（ $11931.216 \mu\text{g}/\text{h} \cdot \text{mg}$ ）的 NH_3 产率和 94.7% 的法拉第效率。此外，CuCoNi-LDH 纳米笼有着优异的 NO_3^- RR 稳定性，在 14 h 的 NO_3^- RR 过程中保持了初始电流密度的 90.4%。该研究为提高 NO_3^- RR 催化活性提供了一种有效的改性策略。

A06-40

磷酸盐修饰 Cu_2O 纳米立方体用于电催化亚硝酸盐还原制氨性能研究

王天昊*

山东科技大学

氨作为一种重要的大宗化学品，对人类生存和国民经济的发展至关重要。电催化还原亚硝酸盐反应（ NO_2^- RR）可在大气环境下实现绿氨的合成和氮循环修复。传统的 NO_2^- RR 电催化剂（如 Cu 基材料）往往存在含氮中间体（ $^*\text{NO}_2^-$ 、 $^*\text{NO}$ 等）吸附过强而活性氢（ $^*\text{H}$ ）供给不足的问题，严重阻碍了含氮中间体的氢化基元步骤。受此启发，本研究通过构建具有不同尺寸、形貌规整的 Cu_2O 纳米立方体，筛选出比表面积大、活性位点数多的最优 Cu_2O 尺寸，而后利用磷酸盐对其进行可控修饰以制备得高效的 $\text{CuOx}@Na_4\text{P}_2\text{O}_7$ 杂化催化剂。研究表明，最优的 $\text{CuOx}@Na_4\text{P}_2\text{O}_7$ 催化剂在 -0.9 V（相对于可逆氢电极）电位下，合成氨产率达到毫克级，而法拉第效率可达 83.9%，同时具有优良的电化学稳定性。谱学和电化学分析揭示了 NO_2^- RR 性能增强的机理：磷酸盐改性有效调节了 Cu 表面的电荷分布，适当减弱了 $^*\text{NO}_2^-$ 中间体的吸附强度，同时尺寸效应优化了催化位点中心数，有利于催化剂表面产生与吸附更多的 $^*\text{H}$ 物种，协同促进了 $^*\text{NO}_2^-$ 中间体的进一步氢化过程。该研究可为无机盐改性 Cu 催化剂的可控设计和活性氢触发的 NO_2^- RR 性能增强机制研究提供了重要的理论参考。

A06-41**原子尺度精准合成**

王定胜*

清华大学

金属纳米、团簇、单原子催化剂作为一类重要的可供人们认识多相催化与均相催化的催化材料，其结构与催化性能的相关性备受关注；揭示其催化本质、认识其规律性是化学化工科学技术中令人期待的重大问题。理解多相催化反应过程中催化剂的活性位点、活性中心，认清影响催化性能关键因素，借助纳米科技所取得的最新成果应用于催化基础与应用研究以提高其活性、选择性和稳定性，以及发现并合成出具有自然界中常温、常压、高效、专一选择性的生物酶催化材料，将是时代对化学工作者提出的最富挑战性的问题。我们围绕“金属纳米、团簇、单原子催化”这一具有重要科学意义和应用价值的研究方向，基于先进的合成技术和表征手段，试图从纳米晶、团簇、单原子不同尺度展开对于催化过程的认识。我们发展了一系列合成方法学，实现了金属间化合物纳米晶、团簇、单原子材料的精准合成，借助于球差电镜、同步辐射等表征技术实现了其精细结构的认识，通过原子尺度下的结构调控和构效关系研究，深入认识和理解金属催化本质。

A06-42**高金属利用率跨尺度多功能催化剂**

孙凌珂、王杨飞、宋玉军*

北京科技大学

析电催化氧还原反应（ORR）与二氧化碳还原反应（CO₂RR）是应对化石燃料过度消耗及其引发的环境问题的关键途径。然而，当前高效催化材料（如单原子催化剂）普遍存在金属利用率低的问题，导致金属资源浪费，阻碍其工业化应用进程。本文采用超声雾化高温裂解法，成功制备了跨尺度(Co/Cu)-NC 多功能催化剂。该合成方法显著降低金属损耗，实现高金属利用率与高金属负载量（22.45 ± 0.07 wt%）。实验结果表明，该催化剂保持优异 ORR 性能（半波电位达 0.87 V，优于商业 Pt/C 催化剂）和高效 CO₂RR 至 CO（法拉第效率可达 70%）性能，虽其催化活性相较于 CoCu 双原子催化剂略有下降，但优于其他 CoCu 基催化剂构型（如团簇/纳米颗粒）。因此，凭借其高金属利用率和良好的综合催化性能，本研究制备的 (Co/Cu)-NC 催化剂展现出规模化生产潜力，为相关电催化反应的工业化应用提供了更具资源效益的催化材料。

A06-43**Laser Synthesis of Non-Precious Metal CoTi-NiTi/NTO Acid Hydrogen Evolution Catalyst with Phase-Controlled**

孙良良*

景德镇陶瓷大学

In this study, CoTi-NiTi/NTO hydrogen evolution electrodes were fabricated on titanium sheets using a one-step laser method. The effects of laser power on the microstructure, phase composition, and electrocatalytic performance were analyzed. Optimal growth of CoTi-NiTi/TNO occurred at 600 W, maintaining smaller grain sizes and resulting in phases like CoTi, NiTi, TiN, TiN_{0.33}, and TiO₂ in a 3D structure. These electrodes exhibited excellent electrocatalytic performance with a low HER overpotential of 42.5 mV at 10 mA cm⁻² and a water decomposition voltage of 1.50 V at 50 mA cm⁻², showing enhanced stability and conductivity in acidic environments.

A06-44

表面改性过渡金属氧化物的光电催化氨氧化制氢性能及反应动力学研究

夏承锴*¹、Sung Soon Kim³、Jung Kyu Kim²

1. 中北大学

2. Sungkyunkwan University

3. Stanford University

光电化学氨氧化反应通过耦合光能驱动与电化学反应，可在温和条件下实现氨氧化制氢，作为一种可持续制氢技术具有广阔前景。过渡金属基材料凭借其成本效益、资源丰度及可调控催化特性，已成为该领域的核心候选体系。当前，提升氨氧化反应的阴极产氢效率和阳极产物选择性是实现其实际应用的关键挑战。本报告聚焦界面结构工程在优化过渡金属基氨氧化光电催化剂性能中的作用机制，阐明通过电子结构调控、活性位点暴露优化及表面化学改性策略，可显著改善反应动力学与产物选择性。重点探讨异质界面构筑、缺陷工程等表面改性方法对电荷传输与含氮中间体吸脱附行为的调控机制。这些表面改性策略的突破不仅推动高效稳定光电催化系统的发展，更为实现规模化、经济可行的制氢技术奠定基础。通过表界面工程策略的系统研究，本研究旨在弥合基础光电化学研究与实际应用之间的鸿沟，加速可持续能源体系的构建进程。

A06-45

PCN-250 的结构调控与电催化合成氨

徐静*

山东科技大学

氨(NH₃)作为一种重要的工业原料和能源载体，广泛应用于化工、农业、生物等领域。电催化硝酸根还原(eNO₃RR)作为环境友好的NH₃的重要合成方法之一，近年受到了广泛的关注。金属有机框架(MOF)以金属离子/簇为节点,有机配体为连接体,具有分散单原子活性位点,在非均相催化中表现出独特的准分子催化性能。MOF 由于其多孔性、晶体结构、可调功能和材料的高表面积在电催化研究中获得了广泛的认可。在这项研究中,我们研究了 PCN-250-Fe₃ MOF 在原始和掺杂形式下生产氨。原始催化剂在相同的电位下达到 65%的法拉第效率,而 Co 掺杂 MOF 催化剂在-1.1V(相对于可逆氢电极)电位下,合成氨产率可达 27669.31 μg h⁻¹ mg⁻¹, 法拉第效率可达 95%。通过 Co/Ni 等过渡金属离子掺杂,调节材料的电子结构,同时优化电催化合成氨过程中电解水产质子与催化加氢等反应过程,降低反应势垒,提高催化性能。从而提高了对 NO₃RR 的催化性能。因此,本研究为高效电催化剂的设计提供了一种策略。

A06-46

铁修饰二维纳米材料的制备及其电催化合成氨性能研究

修子媛*

浙江海洋大学

Fe 是公认的工业合成氨催化剂,在利用绿电催化驱动 N₂ 还原转化为高附加值氨方面也展现显著潜力。基于此,我们受启发于天然固氮酶组成结构,成功构建了 Fe-VS₂ 催化剂和有机介导电子转移中间体(1-氨基蒽醌功能化聚甲基丙烯酸)双组分构成的电催化合成氨仿生固氮体系。实验表明,导电中间体可以最大限度地缩短电子隧穿距离,有效提高催化反应中的电子利用率。此外,我们利用化学气相沉积法合成了单分子层氮化硼-铁-石墨烯三明治结构催化剂,使电子可以直接从裸电极隧穿至催化剂表面,实现直接电子隧穿距离内供电子活化 N₂ 产氨,且通过调控极化电场强度抑制析氢副反应,二者协同使产氨率达到 8.9 μg h⁻¹ cm⁻², 法拉第效率高达 21.7%, 普遍高于其它已报道的 B 基催化剂产氨活性。

A06-47

调控 Cu 电子结构优化关键中间体的生成转化实现高效产氨

刘小芳*

江西科技师范大学

电化学硝酸盐还原反应 (NO₃RR) 的主要挑战在于其决速步 (RDS, 涉及 *NO₃ 向 *NO₂ 的转化) 和选择性决定步 (SDS, 涉及 *NO 向 *NHO 的转化) 存在的高能垒。本工作展示了一种分子催化剂 Cu(I)-phen-SCN, 其 SCN 配体中的硫原子 (S) 与碳 (C) 或氮 (N) 相比具有最高的极化率和最低的电负性。该催化剂优化的电子结构能有效同步降低 RDS 和 SDS 的能垒。原位阻抗和红外光谱研究表明, Cu(I)-phen-SCN 展现出最快的初始反应动力学, 能在极低电位 (+0.2 V vs. RHE) 下深度还原 *NO₃ 生成 *NO 中间体。因此, 所得到的催化剂可实现法拉第效率 (Faradaic Efficiency) 和氮选择性 (N-selectivity) 接近~100%的氨合成, 氨产率高达 241.20 ± 10.82 mg h⁻¹ mgcat⁻¹。原位 X 射线吸收谱 (XAS) 和衰减全反射傅里叶变换红外光谱 (ART-FTIR) 测量表明, Cu(I)-phen-SCN 在整个电化学过程中保持动态稳定状态, 表现出优异的催化耐久性。本工作提出了一种降低硝酸盐基氨合成反应能垒的新方法, 为提高合成氨效率提供了有效策略。

A06-48

Enhancement of electrocatalytic nitrate reduction performance for ammonia synthesis by reconfiguration of the active site of copper-based catalysts

Shanna An*

Shandong University of Science and Technology

Electrocatalytic nitrate reduction (eNO₃RR) as a sustainable nitrogen fixation strategy provides a new pathway to achieve carbon neutrality goals. Copper-based catalysts have attracted much attention due to their potential for efficient ammonia (NH₃) synthesis; however, the mechanism of catalytic action of different copper active centers is still unclear. In this study, CuO and Cu₃(PO₄)₂ were synthesized as pre-catalysts via a sol-gel process, in which CuO exhibited excellent NH₃ yields of 9.72 mg h⁻¹ mgcat⁻¹ (FE = 96.86%, -0.95 V vs. RHE) compared to Cu₃(PO₄)₂ (6.54 mg h⁻¹ mgcat⁻¹, 91.53%). The combination of quasi-in situ XPS and ex situ experiments revealed that the pre-catalyst surface was reconfigured to form stable dual active sites of Cu¹⁺/Cu⁰ (CuO-derived) and Cu²⁺/Cu⁰ (Cu₃(PO₄)₂-derived) during the reaction. Tracking the intermediate evolution by on-line differential electrochemical mass spectrometry (DEMS) and in situ infrared spectroscopy combined with density-functional theory (DFT) calculations, it was found that Cu¹⁺/Cu⁰ lowers the energy potential barrier for the adsorption and activation of the intermediate species, promotes the rapid depletion and hydrogenation of *NO₂, and exhibits higher apparent kinetic activity, leading to excellent ammonia production activity and selectivity. The advantages of different activity ratios in NO₃RR during the catalytic process are revealed, suggesting guidance for the design of other advanced catalysts.

A06-49

PtPdBiSn 纳米板中受限转变引起的界面电子流重定向用于高效乙醇电氧化

邵明杰¹、王爱民¹、付华萌¹、黄小青³、朱正旺^{*2}

1. 中国科学院金属研究所
2. 东北大学
3. 厦门大学

铂基有序六方密排 (HCP) /面心立方 (FCC) 催化剂通过应变调控的脱氢或断键机制在乙醇氧化反应 (EOR) 中展现出巨大潜力, 但其性能仍受限于较弱的界面电子相互作用。本研究报道了一种通过 HCP/FCC

向非密排六方 (H-nCP)/FCC 受限异质结构转变制备的 PtPdBiSn 纳米片催化剂, 其 H-nCP/FCC 异质结构可实现高效 EOR。先进表征和密度泛函理论 (DFT) 计算表明, 受限转变在保留原始应变的同时诱导界面电子流重定向: 产生完全极性反转与通量放大效应。这一效应关键性地增强了 Bi-6p/Pt-5d/Pd-4d 轨道耦合, 抬升 d 带中心, 并促进费米能级 (E_F) 附近的电子局域化, 从而协同优化 EOR 中间体的吸附能表现与反应能垒。该重构催化剂质量活性达 $28.17 \text{ A mg}^{-1}_{\text{NM}}$ (18.4 倍于 Pt/C), 4000 次循环后保持 89.3% 活性 (Pt/C 为 19.2%), 并展现优异 CO 耐受性。本研究通过阐明受限异质结构转变诱导的界面电子流重定向增强机制, 超越了传统铂基 HCP/FCC 异质结构设计范式, 为开发高效类似催化剂建立了普适性策略。

A06-50

共轭聚合物修饰钒酸铋光阳极用于高效的空穴提取

于召氏、申燕、屠国力*

华中科技大学

光电化学 (PEC) 水分解方法可以将太阳能直接转化为氢形式的化学能, 是解决能源问题和实现双碳目标的重要途径。BiVO₄ 光阳极由于其合适的带隙 (2.4-2.5 eV) 和深带边位置 (2.59 V (vs. RHE)), 保证了足够的光吸收和水氧化的驱动力, 从而成为一种很有前途的 PEC 水分解光阳极材料。然而, 由于表面/体电荷的竞争性复合和短的空穴扩散长度 (<70 nm), 仍然导致 BiVO₄ 电极的光电性能较低。在 BiVO₄ 光阳极上建立电荷转移通道是实现有效空穴提取和提高光电化学性能的可行策略。

本文合成了一种共轭聚三苯胺框架 (CPF-TTPATA) 作为 NiFeOx 催化剂和 Mo:BiVO₄ 光吸收剂之间的空穴传输层, 用来提高电荷分离效率。CPF-TTPATA 由供体三苯胺片段连接的受体三嗪片段组成, 可以有效的加速光生电荷的离域, 并与 Mo:BiVO₄ 具有合适的能带对准, 形成交错的 ii 型异质结, 有利于空穴的提取。同时, CPF-TTPATA 钝化了 Mo:BiVO₄ 的表面陷阱态, 促进了 Mo:BiVO₄ 与 CPF-TTPATA 之间的界面电荷转移。因此, 在我们精心设计的 Bi³⁺-受体-供体-催化剂导电通道中, 可以实现光生电荷的有效分离。制备的 NiFeOx/CPF-TTPATA/Mo:BiVO₄ 光阳极在 1.23 V (vs. RHE) 和模拟 AM 1.5G 阳光 (100 mW cm^{-2}) 下具有极高的光电流密度 (6.94 mA cm^{-2}) 和电荷分离效率 ($\approx 100\%$)。这项工作为设计用于高性能太阳能水分解应用的有机和无机杂化光阳极提供了新的见解。

A06-51

基于 Se 阴离子调控的高熵硒化物催化剂设计及其高效析氧反应活性的研究

张静、刘斌*

上海大学材料科学与工程学院

针对传统高熵甘油酸盐催化剂存在的导电性弱、活性位点暴露不充分及反应动力学缓慢等科学问题, 本研究提出基于阴离子调控与微结构设计的协同优化策略, 以高熵甘油酸盐为前驱体, 通过引入阴离子硒 (Se), 采用溶剂热-水热-低温硒化三步合成工艺, 成功制备出高熵硒化物催化剂 (FeCoNiCrMn-Se)。微观结构表征结果显示, 经硒化处理后, FeCoNiCrMn-Se 球体表面的纳米片分布更加致密, 并形成高比表面积蛋黄壳结构, 其比表面积可达 8.75 mF cm^{-2} , 远高于硒化前的 3.20 mF cm^{-2} , 为电催化反应提供了丰富的活性位点。X 射线光电子能谱 (XPS) 进一步证实, Se 的引入诱导 Fe、Co、Ni、Cr、Mn 等金属价态向高价态转变, 同时 Se 与金属元素形成的化学键有效优化了材料的电子结构。在碱性析氧反应 (OER) 性能测试中, FeCoNiCrMn-Se 在 10 mA cm^{-2} 下的过电位为 296 mV, 显著低于未硒化样品和商业 RuO₂ 催化剂, 且具有最小的 Tafel 斜率 (49.7 mV dec^{-1}), 表明该催化剂具有快速的反应动力学特性, 且在大电流密度条件下的性能优势尤为显著, 充分体现了硒掺杂对催化剂 OER 活性的提升作用。本研究通过阴离子掺杂与蛋黄壳结构设计的协同策略, 成功构建了具有高效电荷传输网络和丰富活性位点的高熵催化体系, 为设计高熵非贵金属电催化剂提供了新思路。

A06-52

质子交换膜电解水阳极催化材料

郑亚荣*

合肥工业大学

质子交换膜电解水作为实现可再生能源电解水制氢的关键技术，具有电流密度高、产氢纯度高优点。但由于过度依赖贵金属，阳极反应动力学缓慢等因素，严重限制了器件性能提升。基于多组分金属氧化物纳米复合材料与低维过渡金属硫族化合物的设计合成，开发了系列低成本、高效、稳定的氢/氧电极材料。针对电解水阳极材料开发及反应机理面临的瓶颈，通过精准调控合成，利用超高真空质量选择合成系统制备了 12 种不同质量（尺寸分布在 1~5 nm）的铋钽氧纳米复合团簇/颗粒，用于质子交换膜电解水制氢阳极材料。研究发现，当此类催化剂在小于 2 nm 的尺度下，基于量子隧穿效应，针对电解水阳极半反应，宽带隙金属氧化物纳米复合材料表现了相似的高催化析氧活性和稳定性，在 320 mV 的过电位下的平均质量活性为 1200 A g⁻¹Ir。同时，利用新型多孔芯片原位电化学质谱，结合同位素标记法定量活性位点数，系统评估了此类铋基纳米复合材料在动态测试过程中电催化析氧速率与催化剂的本征活性。

A06-53

利用界面工程构建梯度轨道耦合增强电催化析氧反应

方星月^{1,2}、石睿^{1,2}、张纪光^{1,2}、刘雅娜^{1,2}、王军^{1,2}、朱云峰^{*1,2}

1. 南京工业大学材料科学与工程学院
2. 江苏先进无机功能复合材料协同创新中心

当前在绿色电解水制氢过程中，实现高活性和稳定的析氧反应（Oxygen evolution reaction, OER）仍具有挑战性。镍基非均相催化剂由于具有独特的 d 轨道电子构型和特定的氧化还原电位，在电催化分解水方面展现出巨大的应用前景。因此，本文提出了一种新颖可行的界面工程诱导梯度轨道耦合策略，通过在 La₂O₃-NiO 模型上构建 Ni 3d-O 2p-La 4f 单元位点来调整 OER 性能。通过梯度轨道耦合，La 原子和 O 原子间的离子特性被赋予了更高的共价性，从而优化了 Ni 位点的 eg 占有率，并削弱了 O-H 键，最终打破了 Ni-O-La 单元位点上的*OOH 和*OH 之间的比例关系。更具体地说，La 的引入能产生协同效应，优化内部电子结构，从而加强中间产物的吸附和界面电荷转移。因此，NiO-La₂O₃/NF 电催化剂在电解水中具有卓越的电催化性能。达到 10、50 和 100 mA cm⁻² 电流密度所需的相应 OER 过电位分别为 198、264 和 291 mV。实验和理论研究的综合结果表明，La₂O₃ 的原子耦合不仅能显著引发氧空位的产生，加速 NiO 向活性 NiOOH 的相变，还能在原位与形成的 NiOOH 建立化学键，实现电子注入，从而有效抑制可接触的 NiOOH 纳米域的聚集，优化 OER 含氧中间体的反应自由能。此外，不同能级轨道的耦合精确的调节了 Ni-O-La 界面的电子排布，并优化了 Ni 3d 轨道的电子构型。本研究通过构建梯度 3d-2p-4f 轨道耦合，为电子调制策略提供了新的视角。

A06-54

Modulating Multiple Catalytic Sites for Enhanced Tandem Nitrate Reduction Reaction

Muwei Ji*, Yaoting Huang, Zheling Wang, Yibing Song, Hong Xia, Fushen Lu

Shantou University

The electrocatalytic reduction of nitrate represents a promising green pathway for ammonia synthesis. However, this process involves multiple reaction steps, making it challenging to achieve both high conversion efficiency and selectivity. While constructing catalytic sites with high activity would enhance electrocatalytic performance, single-component active sites often fail to enable effective synergy across multi-step reactions. Therefore, it may facilitate tandem reactions on electrode by establishing multi-functional catalytic site systems for modulating the kinetics of each steps of nitrate reduction reaction. Copper-based catalysts performed

exceptional activity in reducing nitrate (NO_3^-) to nitrite (NO_2^-). By integrating efficient hydrogenation catalytic sites, a complete tandem catalytic process of $\text{NO}_3^- \rightarrow \text{NO}_2^- \rightarrow \text{NH}_3$ could potentially be achieved.

A06-55

双金属共掺杂稳定 RuO_2 催化剂中的超价态 Ru 位点实现长寿命安培级质子交换膜水电解

黄虹浦、谢水奋*

华侨大学

探索无铱 (Ir) 阳极催化剂对于实现大规模质子交换膜水电解 (PEMWE) 以生产绿色氢气具有重要意义。本研究发现, 通过协同掺杂钼 (Mo) 和铑 (Rh) 的二氧化钌 (Mo,Rh-RuO_2) 催化剂能够显著增强超价态钌位点, 有效打破酸性析氧反应 (OER) 中活性与稳定性之间的平衡限制, 从而实现长寿命的安培级质子交换膜水电解。采用简单的熔盐法成功合成了交联的超细 Mo,Rh-RuO_2 纳米催化剂。该催化剂在 OER 中展现出极低的过电位, 例如在 100 mA cm^{-2} 时仅为 208 mV, 并且具有卓越的稳定性。在质子交换膜电解槽中, 该催化剂仅需 1.58 V 和 1.87 V 的电池电压即可分别达到 1.0 A cm^{-2} 和 3.0 A cm^{-2} 的电流密度, 并且在 1.0 A cm^{-2} 下进行超过 2000 小时的耐久性测试时, 衰减率仅为 0.03 mV h^{-1} 。其优异的 OER 性能和电解槽性能在众多先进电催化剂中脱颖而出。机理研究表明, Mo,Rh-RuO_2 催化剂显著增加了 OER 活性超价态钌位点, 并且增强了 Ru-O 键。大量反应路径从传统的晶格氧演化机制转变为吸附物演化机制, 极大地抑制了晶格氧的消耗。此外, Mo,Rh-RuO_2 催化剂还具备关键的氧空位自愈能力和稳定的表面超价态钌位点, 显著提升了其长期稳定性。

A06-56

助催化剂调控的光电催化甘油氧化耦合产氢研究

王剑*

太原理工大学

采用在动力学上更快且需要更低电位的甘油氧化反应 (GOR) 代替 OER 不仅能提高光电催化 (PEC) 分解水产氢效率, 而且能够生成高附加值的产品, 如 1,3-二羟基丙酮 (DHA)。然而, 由于甘油的伯羟基和仲羟基的活化能相似, 将甘油高选择性氧化为 DHA 并同时产生大量氢能源具有极大的挑战。采用原位生长技术在 BiVO_4 表面成功负载了非晶态 FeOOH 助催化剂, 在标准光照条件 AM 1.5G (100 mW cm^{-2}) 和 1.23 VRHE 的外置偏压下, 甘油醛的生成速率显著提升至 $709 \text{ mmol m}^{-2} \text{ h}^{-1}$, 同时保持 63.3% 的高选择性, 是纯 BiVO_4 的 2.35 和 14.98 倍。调控电压和 pH 等参数, 负载 NiOOH 的 BiVO_4 则实现了对 DHA 的选择性调控。AgAu 合金纳米颗粒负载于 TiO_2 表面调控了粒子表面的电子结构, 增强了复合光阳极对甘油仲羟基的吸附, 促进甘油选择性转化为 DHA。构筑 TiO_2 纳米棒阵列上负载的 WO_3 光阳极, WO_3 的负载促进了 C3 产物的解吸, 从而提高了 C3 产物的选择性。在 TiO_2 纳米棒阵列上负载了对甘油中间羟基有这较强吸附能力线状 Co-LDH, 制备的复合光阳极 Co-LDH/ TiO_2 对甘油中间羟基的吸附显著增强和 DHA 的快速解吸, 使 DHA 选择性达到 48%。进一步负载颗粒状 Bi_2O_3 和线性 Co-LDH 到 TiO_2 纳米棒阵列, 开发了 Co-LDH/ Bi_2O_3 / TiO_2 三元光阳极, 通过空穴氧化以及羟基自由基氧化双重氧化途径实现了甘油转化速率以及制氢速率提高的同时, DHA 选择性(63%)进一步增强。上述研究为光电催化甘油选择性氧化为高附加值产物提供了新的见解。

A06-57

碳限域策略实现高熵金属间化合物纳米颗粒的普温可控合成及其电催化性能研究

胡治州*¹、徐志航²、朱叶²

1. 中南民族大学
2. 香港理工大学

高熵合金 (HEA) 作为一种新型的合金材料, 凭借其丰富的组分及结构可调性, 在催化等领域表现出广阔的应用前景。构筑具有有序结构的高熵金属间化合物 (HEI), 可以有效结合高熵合金及有序合金二者共同的优势。然而, 高熵合金苛刻的制备条件常与有序合金的形成相矛盾。针对这一问题, 我们提出了一种碳限域辅助的高熵固溶体及高熵有序合金的常规化制备, 实现了 PtFeCoNiMn 五元高熵金属间化合物纳米颗粒的普温合成。透射电镜表征清晰地揭示了其形成过程经历五个阶段: 单原子、团簇、低结晶性纳米颗粒、高熵合金及高熵金属间化合物五个阶段。其中金属离子的预先原子级分散及碳层限域效应起到至关重要的作用。将金属盐预先分散在碳前驱体骨架中, 有效避免金属离子在后续加热过程中的特异性成核。而碳限域效应可以有效改善颗粒在长时间加热过程中的团聚问题及相分离问题。所合成的高熵金属间化合物表现出优异的电催化氧还原反应 (ORR) 性能, 其质量比活性约为 Pt/C 催化剂的 3.2 倍, 并且在经历 30,000 次加速循环稳定性测试后, 其质量比活性仅衰减了 20%。

A06-58

地外环境的二氧化碳电化学转化

胡博韬*

钱学森空间技术实验室

开发可持续的二氧化碳还原及产氧系统, 正成为人类实现长期太空飞行和持续地外生存的关键前提。地外人工光合作用技术旨在模拟绿色植物在地外空间环境中的自然光合作用过程, 通过光/电催化将二氧化碳高效转化为氧气和碳氢化合物, 为可持续载人航天探索开辟了新途径。为验证该技术在微重力环境下的技术可行性, 于 2024 年 12 月至 2025 年 1 月期间, 中国空间站梦天实验舱搭载的地外人工光合作用试验系统成功进行了在轨试验验证。在舱内展开的 12 种不同工况下, 均通过电化学技术成功实现了乙烯和氧气的在轨生成。此次在轨试验的成功验证, 为利用并开发地外原位资源奠定了重要的实践基础。

A06-59

Elucidating Rate-Limiting Steps in CO₂/CO Electroreduction Using Nanostructured Catalysts

Wanyu Deng*

Berkeley Education Alliance for Research in Singapore (BEARS) & National University of Singapore (NUS)

Understanding how nanostructure influences catalytic pathways is essential for advancing electrochemical CO₂ and CO conversion. In this work, we explore how well-defined nanomaterials can serve as platforms for deconvoluting complex reaction mechanisms in electroreduction systems. We first synthesized thin-film and nanoparticle catalysts—including Au, Ag, Sn, and In—via magnetron sputtering to systematically probe the two-electron CO₂ reduction pathway. Through pH-dependent measurements and kinetic isotope effect (KIE) studies, we reveal that product rates for CO and formate are independent of proton availability, indicating that CO₂ adsorption, rather than proton transfer, is the rate-limiting step. For multi-carbon product formation, we used sputtered polycrystalline Cu films and reconstructed oxide-derived Cu nanoparticles to uncover that *CO-*CO dimerization governs C₂⁺ product selectivity, regardless of initial morphology. The partial pressure dependence and pH/KIE invariance support this mechanistic assignment. These findings demonstrate how precise nanomaterials synthesis—coupled with kinetic analysis—enables mechanistic resolution and paves the way toward rational catalyst design for selective CO₂/CO electroreduction.

A06-60**氧化镍增强 NiFe LDH 电极在工业级电流密度下高效稳定电解水研究**

刘诗熠、邢欣欣、王毓德*

云南大学材料与能源学院

NiFe 层状双金属氢氧化物 (NiFe LDH) 在析氧反应 (OER) 中得到了广泛的研究, 但在高腐蚀、高氧化环境中易出现催化剂脱落、气泡堵塞和欧姆电阻增加等问题, 导致性能衰退和使用寿命缩短。针对上述挑战, 本研究创新性地通过预氧化煅烧在泡沫镍表面原位生长致密 NiO 中间层, 并协同电化学沉积技术调控 NiFe LDH 生长, 从而增强催化剂-基底界面结合力与机械稳定性、优化电子传输路径与催化活性, 并提升抗腐蚀能力和传质效率。相较于商业贵金属基催化剂电极, 本研究构筑的电极在过电位仅为 340 mV 时即可实现 1 A cm^{-2} 的电流密度, 且连续运行 100 h 后仍保持稳定的形貌与性能, 体现出良好的机械稳定性和催化活性。本研究提出的氧化层辅助电沉积技术为工业级电流密度下水电解提供了兼具高活性与长效稳定的电极解决方案。

A06-61**Controlled Synthesis of Ultrafine Pt Nanocubes Using Carbon Nanotube Bundles as Templates**

Kang Li, Feng Zhang, Chang Liu*

Institute of metal research, Chinese Academy of Sciences

Pt-based nanocrystals with high activity and stability are highly desired for efficient electrochemical ammonia oxidation reactions (AOR). However, it is still very challenging to synthesize shape-controlled ultrafine ($d < 3 \text{ nm}$) Pt nanocrystals. Herein, Pt nanocubes (NCs) enriched with (100) facets were prepared by fast heating Pt nanocubes confined anchoring on the single-walled carbon nanotube (SWCNT) bundles. Radial confinement maintains the small size, while the axial induction provides a unique template for synthesizing Pt NCs. This method is solvent-free, fast and controlled, and the Pt NCs are monodispersed on the SWCNT films. Experiments and simulation calculations verified the mechanism for the formation of Pt NCs. As revealed by controlled experiments and theory calculations, the radial confinement and axial induction of SWCNTs, high temperature ($\geq 1000 \text{ }^\circ\text{C}$), fast heating ($> 300 \text{ }^\circ\text{C/s}$) and cooling, and a small amount of oxygen are necessary for the synthesis of Pt NCs. Pt NCs/SWCNTs show significantly improvement on AOR activity and durability. This study guides a new direction for controlled synthesis of metal nanocrystals with specific structures and high catalytic activities.

A06-62**Single-Atom Iridium Orchestrates a Reaction Pathway Shift to Activate Lattice Oxygen for Efficient Oxygen Evolution**

Zhongxin Duan, Zhenduo Cui, Shengli Zhu*

School of Materials Science and Engineering, Tianjin University

Overcoming the intrinsic limitations of the oxygen evolution reaction (OER) remains a formidable challenge in the pursuit of efficient electrocatalytic water splitting. Herein, we demonstrate a method for selective anchoring of an iridium atom near a NiFe layered double hydroxide iron site. This strategy enables direct formation of O-O coupling pathway via the lattice oxygen mechanism (LOM), thus circumventing the thermodynamic constraints imposed by the conventional adsorbate evolution mechanism (AEM). The catalyst achieves an ultralow overpotential of 213 mV at 50 mA cm^{-2} and maintains 1000 h of operation at 100 mA cm^{-2} in alkaline media. In situ attenuated total reflection surface-enhanced infrared absorption spectroscopy (ATR-SEIRAS), in situ electrochemical Raman spectroscopy, TMA⁺ cation probing, and pH-dependence analysis collectively provide

compelling evidence for the lattice oxygen mechanism (LOM) pathway. When integrated into an anion exchange membrane water electrolyzer (AEMWE), the system delivers 1 A cm^{-2} at $<1.73 \text{ V}$ with an energy efficiency of 72.4% and a projected hydrogen cost of \$ 0.93 per kg-outperforming the U.S. DOE 2026 target. Furthermore, density functional theory (DFT) calculations and X-ray absorption fine structure analysis (XAFS) demonstrate that the Ir single atoms enhance metal-oxygen hybridization and raise the O 2p band center, thus promoting the electronic transition from AEM to LOM. These findings not only advance our understanding of single atom modulated catalysts but also highlight their potential in optimizing OER systems for sustainable energy applications.

A06-63

二维高熵多金属（氧）氢氧化物的拓扑合成用于增强晶格氧化机理

刘思佳、贾宝瑞、秦明礼*

北京科技大学

析氧反应（OER）电催化剂由于反应动力学缓慢和电位高，面临着活性和稳定性之间的权衡。在此，我们提出了一种创新的拓扑策略来制备二维多金属（氧）氢氧化物，包括三元 CoFeZn，四元 CoFeMnZn 和高熵 CoFeMnCuZn。合成的关键在于以富钙氧化褐铁矿为前驱体，该前驱体具有固有的结构灵活性，可以进行元素调整，并在碱性条件下从金属氧八面体的点共享结构拓扑转变为边共享结构。催化剂中 Zn 的存在导致 O 2p 带中心向费米能级移动，产生更多的 Co^{4+} ，这些 Co^{4+} 在氧配体中驱动空穴，促进分子内氧偶联。利用四甲基铵化学探针检测过氧样（ O_2^{2-} ）阴性物质，并进行 ^{18}O 同位素标记实验，确定了触发晶格氧化机理。结果表明，该催化剂在 $10 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ 下的过电位为 267 mV，是性能最好的非镍基催化剂之一。重要的是，与传统的 NiFe 和 CoFe 氢氧化物/（氧）氢氧化物相比，这些催化剂在 OER 过程中也表现出较高的铁浸出性。组装的锌空气电池可以在 1.93 V 的低充电电压下稳定运行超过 225 小时。

A06-64

多元异质结光阳极的界面调控与光电化学水氧化性能优化

熊玉立*

重庆师范大学

光电化学水分解技术是将太阳能转化为氢能的重要途径，其核心挑战在于设计高效稳定的光阳极材料。近年来， BiVO_4 、 $\text{In}_{2.77}\text{S}_4$ 等窄带隙半导体因其合适的能带结构备受关注，但其载流子分离效率低和表面反应动力学缓慢的问题严重限制了其实际应用。本报告系统探讨了通过异质结构建、界面工程和电子态调控等策略提升光阳极性能的研究进展。首先，核壳结构设计可有效促进电荷分离。通过溶剂热法构建了 $\text{Bi}_2\text{S}_3/\text{BiVO}_4$ 核壳纳米结构， Bi_2S_3 核的窄带隙特性拓宽了光吸收范围，而紧密的异质界面加速了光生电子从 BiVO_4 向 Bi_2S_3 的转移，使水氧化光电流密度达到 $6.0 \text{ mA}/\text{cm}^2$ (1.23 V vs. RHE)，相较于纯 BiVO_4 提升近 3.3 倍。其次，表面电子态调控是优化反应动力学的关键。通过磷掺杂和 $\text{In}(\text{OH})_3$ 修饰协同调控 $\text{In}_{2.77}\text{S}_4$ 的表面电子态，降低了空穴传输势垒。XPS 和 DFT 计算表明，P 掺杂诱导的富电子表面显著提升了催化活性位点的电荷密度，而 $\text{In}(\text{OH})_3$ 钝化表面缺陷抑制了载流子复合。进一步地，异质结的取向电荷传输设计可突破体相复合限制。聚焦于 $\text{BiVO}_4/\text{Bi}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ 异质结，通过界面能带匹配和内建电场构建调控实现了光生载流子的各向异性传输。研究发现， $\text{Bi}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ 与 BiVO_4 的共格界面可降低界面电阻，使电荷转移效率提升至 64%。

综上，这些研究揭示了多元异质结光阳极的性能优化路径：1) 通过能带梯度设计（如核壳结构）实现体相电荷高效分离；2) 利用掺杂和表面修饰调控活性位点电子结构；3) 借助界面工程优化异质结的电荷传输动力学。未来研究可关注多策略协同（如核壳异质结结合表面催化修饰）以及原位表征技术的应用，以进一步推动 PEC 水氧化的实际应用。

A06-65

二维限域 Ir/WO_x 异质界面促进酸性氧析出反应实现安培级稳定的质子交换膜水电解

蔡俊林、谢水奋*

华侨大学

铱 (Ir) 基材料是质子交换膜水电解槽 (PEMWE) 中酸性氧析出反应 (OER) 目前唯一可商业化的阳极电催化剂。降低 Ir 用量并提升其催化性能是实现 PEMWE 规模化应用的关键。本研究通过精准合成策略, 构建了由 Ir 纳米晶粒嵌入非晶态 WO_x 基体的超薄二维杂化纳米片 (Ir/WO_x NSs), 其丰富的二维限域异质界面显著提升了酸性 OER 活性和稳定性。在 300 mV 过电势下, Ir/WO_x NSs 的质量活性达 2.34 A mgIr⁻¹, 分别为 Ir NSs 和商用 Ir/C 催化剂的 11.1 倍和 9.8 倍。机理研究表明, 晶体 Ir 纳米晶与非晶 WO_x 基体的二维限域效应不仅形成协同双功能活性位点, 还加速电荷传输并促进水解离初始步骤。同时, 界面 Ir 原子优化了 *O 中间体吸附及 *OOH 生成路径, 通过吸附质演化机制降低反应能垒。基于 Ir/WO_x NSs 组装的 PEMWE 在 1.0 A cm⁻² 电流密度下仅需 1.71 V 槽电压, 并展现出优异的长期稳定性。

A06-66

利用离子辐照技术在缺陷态的 NiO 上锚定硫酸盐提升析氧反应

李德润*

湖北师范大学

在过去的十年中, NiO 作为一种高性价比的 OER 电催化催化剂引起了广泛的关注。然而, 其相对较差的性能和导电性限制了其商业应用。在这里, 我们重点介绍了一种独特的离子辐照方法来提高 NiO 的催化活性。得益于硫酸盐锚定和 He⁺ 离子辐照引入氧空位, 最佳催化剂 (ir-S-NiO) 在 10 mA cm⁻² 下的过电位为 269 mV, 表现出优异的 OER 性能。此外, ir-S-NiO 构建的阴离子交换膜水电解槽 (AEMWE) 需要 1.72 V 的电池电压才能达到 0.1 A cm⁻² 的电流密度, 并且在 0.5 A cm⁻² 的电流密度下可以持续稳定运行 300 小时, 没有明显的衰减。本工作为开发高性能、稳定的 OER 电催化剂提供了新的途径。

墙报

A06-P01

一种利用 dsDNA 介导的 MB-胆固醇共固定化的碱基堆叠驱动的比率电化学生物传感器

吴嘉衍、许丽兰、林丽芳、陈观宇、陈明珠、陈敬华*

福建医科大学药学院

电化学 DNA 生物传感器 (E-sensors) 由于其稳定性、准确性和重现性较差, 在临床应用中受到限制。在此, 我们基于提出的多功能和包容性的六硫醇自组装单层 (HT SAM) 平台, 使用双链 DNA (dsDNA) 作为“中介”, 系统地招募胆固醇和亚甲基蓝 (MB), 将固定和参考功能结合到 HT SAM 上。通过增加锚定位点, 显著提高了 DNA 探针固定化在界面上的稳定性和效率。此外, MB 还作为固定过程中的内部参考信号, 解决了传感器再现性差导致的精度低的问题。dsDNA 的直立构象和同轴碱基堆叠促进了目标-探针的相互作用, 提高了界面 DNA 探针的杂交效率和杂交速率。紧密排列的疏水 HT SAM 促进了铁氰化钾介导的级联电催化反应, 进一步提高了传感器的灵敏度。作为概念证明, 设计的碱基堆叠驱动的比率电化学生物传感器使用 dsDNA 介导的 MB-胆固醇共固定化, 成功检测到 SARS-CoV-2 N 基因相关片段, 显示出异常的灵敏度, 检测限低至 1.32 fM。该传感器具有高检测性能、易于操作、成本低, 非常适合于大规模疾病筛查中的即时检测。最重要的是, 疏水 HT SAM 作为一个多功能的平台, 结合易于修饰 DNA 结构来招募功能分子并最大限度地发挥其贡献, 是协同提高电子传感器整体性能的关键。

A06-P02**机器学习辅助筛选高效量子点析氢纳米酶**

吴朋朋、文海龙、郭占君*、梁敏敏

北京理工大学

光催化分解水制氢技术可以将太阳能转化为高热值且环保的氢能源。量子点材料因其独特的光吸收和能带可调节等量子效应，被广泛应用于光催化分解水的研究中。然而，其表面催化效率低的缺点限制了其广泛应用。目前，负载助催化剂是提高其光制氢效率有效的手段之一，其中产氢活性最高的是 Pt 金属。但是，由于其价格高昂且储量有限，因此寻找经济且高效的助催化剂变得至关重要。受天然氢化酶活性中心的启发，我们构建了一个针对金属硫化物基纳米酶产氢性能的机器学习 (ML) 预测模型。之后，我们合成了几种典型的析氢纳米酶去对预测模型进行实验验证。通过选用含镉量子点 (QD) 作为主催化剂，并将纳米酶助催化剂负载于其表面，活性测试结果表明其 HER 活性最高比单独使用 QD 提升了 35 倍以上；且在同等产氢速率条件下，与贵金属 Pt 相比，纳米酶的成本降低了 525 倍。随后通过物相分析及光、电化学等测试证明了我们合成的纳米酶具有类氢化酶的催化机理。基于这些实验结果，我们相信基于机器学习模型筛选的纳米酶会打破目前钌和铂等稀有金属基催化剂的依赖，为今后的产氢行业提供新的选择。

A06-P03**微流控限域制备超薄二维 cMOF 用于高效电催化 CO₂ 还原制 CH₄**

岳骄娜、孟婕、王颖、翟全国*

陕西师范大学化学化工学院

电催化二氧化碳还原 (CO₂RR) 是实现碳循环利用的关键技术，开发高效稳定的催化剂是其所面临的挑战之一。导电金属-有机框架 (cMOF) 材料因其可调控的孔道结构、高导电性、丰富的活性位点，在 CO₂RR 转化领域展现出巨大的潜力。但传统合成方法存在掩蔽 MOF 活性位点，传质受限等问题。本研究基于微流控液滴连续合成技术，通过微尺度反应环境精准调控二维导电 cMOF 的层厚度。实验表明，该合成技术凭借超高的传质/传热效率在流速 $Q=1.28 \text{ mL/min}$ ，时间 $t=5 \text{ min}$ 实现了 $502 \text{ kg m}^{-3} \text{ day}^{-1}$ 的时空产率 (STY)。所制备的超薄 cMOF 与传统水热制备下的棒状结构相比，CO₂RR 还原生成 CH₄ 的效率提升了 1.8 倍，展现出优异的催化效率和甲烷选择性。本研究不仅为超薄二维 cMOF 的制备提供了新策略，其连续合成的技术也展现出了巨大的工业应用潜力，为 CO₂RR 工业化应用提供了技术支撑。

A06-P04**The photothermal effect of light-trapping structures**

Huijuan Dong, Jiayi Zhu, Yingni Zhou, Xiaojing Wu, Fushen Lu, Muwei Ji*

Shantou University

Carbon fiber (CF) possesses excellent light-absorbing properties due to the broad spectral absorption properties but it was limited in the photothermal conversion applications because of the high reflection from their smooth surface. Aiming to this issue, light-trapping structures were constructed on the surface of carbon fibers via corrosion with cations catalysis and growth carbon array. By tailoring the sizes of pores and the structure of array, the light absorptions of CFs were remarkably promoted and thus enhance the photothermal conversion. The photothermal-driven interfacial evaporation manifested the potential application of CFs with light-trapping structures. This work provides simple strategies for obtaining efficient carbon fibers-based photothermal materials.

A06-P05**Controllable preparation of RuCu nanoparticles for nitrate reduction**

Ce Zhou*

Shantou University

Due to the serious nitrate pollution and lack of ammonia in China, a technology for reducing nitrate is urgently needed. Due to the high nitric acid reduction activity of Ru and the inhibition effect of Cu on hydrogen evolution, the method of preparing and customizing RuCu is simple and has high nitric acid reduction performance. Therefore, the construction of RuCu nanoparticles with high density and small size is a possible way to obtain high atomic utilization efficiency, and its nano particle size and high loading per unit area will bring high electrocatalytic activity. RuCu nanoparticles supported by B₄C, and copper foam were prepared by hydrothermal method and in-situ synthesis method respectively, and RuCu catalyst with high activity for nitric acid reduction (NO₃RR) to produce ammonia was constructed. The results showed that the ammonia yield of RuCu /B₄C catalyst was 55.60 mg h⁻¹ mgcat⁻¹, and the Faraday efficiency (FE) was 92.8% under the condition of -0.6 VRHE; However, RuCu/CF catalyst has excellent selectivity for ammonia reduction under neutral conditions. In 200 ppm neutral nitrate solution, it can achieve 100% ammonia reduction selectivity and 96.5% high Faraday efficiency. Further studies showed that the adsorption of NO³⁻ was enhanced by the support B₄C in RuCu/B₄C catalyst, and the hollow RuCu nanoparticles provided a high specific surface area, which achieved the high yield of ammonia. In the RuCu/CF catalyst, the foam copper provides a high specific surface area and can be used as a self-supporting electrode to achieve simple and rapid preparation of the catalytic electrode. The high-density RuCu heterojunction supported on it provides efficient nitrate reduction performance.

A06-P06**构建晶体/非晶纳米结构 Mo-Ni₂P/NF 用于高效电催化水分解**

马亚丽、程亮、王乾、杨婷、王婷婷*

宁夏大学

电解水技术不仅能实现可持续能源转化，有效存储间歇性和波动性可再生能源，还具有操作简便、投资成本低等优势，有望成为未来能源体系变革的核心。本研究以泡沫镍（NF）为生长基底，通过电沉积结合次磷酸盐热分解法，成功制备了具有独特纳米晶修饰非晶纳米片微观结构的钼掺杂磷化镍（Mo-Ni₂P/NF）电催化剂。在 1.0 M KOH 电解液中，所制备的催化剂表现出优异的催化活性和稳定性，析氢反应（HER）和析氧反应（OER）分别仅需 79.5 mV 和 210 mV 的过电位即可达到 10 mA cm⁻² 的电流密度。其卓越的电催化性能不仅源于 Mo 元素的掺杂，提高了单个活性位点的本征催化能力并增强了催化剂的抗氧化性；同时得益于非晶层与晶化纳米颗粒之间的强相互作用，有效防止了颗粒团聚和失活，且纳米颗粒间的适当接触提高了电荷转移速率，弥补了非晶层导电性不足的缺陷。本工作充分证明了 Mo-Ni₂P/NF 作为先进电催化剂在可再生能源应用中的巨大潜力。

A06-P07**在非晶/晶态异质结构上生长纳米晶钌以实现高效持久的析氢反应**

黄权斌、刘一蒲*

海南大学

设计高效的析氢反应催化剂以降低反应过电位，对推动电解水和清洁能源的发展具有关键作用。Ru 基催化剂虽被视为 Pt 基催化剂的理想替代品，但其在析氢反应过程中会发生奥斯特瓦尔德熟化、颗粒团聚、活性组分溶解及脱落等问题，这些问题严重制约了其长期稳定性。本研究通过电沉积结合浸渍法制备了具有非晶/纳米晶异质结构特性的 NiP_x-Ni 载体，并采用原位置换策略构建了 Ru-NiP_x-Ni 结构。通过置换反应增

强金属-载体相互作用,可同时实现 Ru 纳米颗粒的稳定并优化了界面电子传输。具体而言,晶态 Ni 相的有序原子排列保障了电荷高效传输,而非晶相的高缺陷密度在为 Ru 团簇提供锚定位点的同时,显著增强其催化稳定性。电化学测试表明,这种协同结构使催化剂在 1 M KOH 电解液中表现出卓越性能,实现 10 和 100 mA/cm² 电流密度下分别仅需 19 mV 和 70 mV 的过电位,还能在 100 mA/cm² 下稳定运行超过 55 小时。该工作通过调控催化剂晶态/非晶界面组成,实现了活性和稳定性的协同提升,为开发高效 HER 催化剂提供了新思路。

A06-P08

基于非富勒烯小分子 Y6 修饰钙钛矿量子点的光学性能研究

何沂婷、李阿俊、朱夏禹、李博*

江西理工大学

CsPbBr₃ 钙钛矿量子点具有窄带发射,高光致发光量子产率,高缺陷容忍因子等优异特性,在发光二极管(LED)、太阳能电池等领域有广阔应用前景,但 CsPbBr₃ 量子点表面未配位的铅离子缺陷限制了其光学性能。本研究采用热注入法合成 CsPbBr₃ 量子点,随后采用非富勒烯小分子 Y6 (BTP-4F) 钝化其表面 Pb²⁺ 缺陷,探究了自然光、紫外光和红光对其结构和发光性能的影响。结果表明,经 Y6 修饰后 CsPbBr₃ 量子点 PLQY 从 79.24% 提升至 94.53%, 荧光寿命从 11.52 ns 提升至 12.94 ns。在自然光环境下, Y6 修饰有效缓解了量子点团聚,水氧稳定性有所提升,发光稳定性提升了 52%。经紫外光和红光处理后,经 Y6 修饰的量子点稳定性均明显提升,表明 Y6 修饰有效缓解了量子点吸收高能紫外光子可能导致的表面化学键断裂以及堆积,且有效缓解了红光色温带来的影响。综上所述, Y6 修饰 CsPbBr₃ 钙钛矿量子点具有高发光性能以及高稳定性,在光电器件领域中有巨大应用潜力。

A06-P09

高锰含量亚微米 Cs₂MnF₆:Si⁴⁺@Cs₂SiF₆ 荧光粉的制备及其发光性能与耐湿性协同提升

王佳男¹、彭家庆^{*1,2,3}

1. 江西理工大学

2. 中国稀土集团赣州中蓝稀土新材料科技有限公司

3. 国家稀土功能材料创新中心

Mini-LED 显示技术为实现高分辨率成像,要求发光材料具备亚微米级颗粒尺寸及高吸收效率。但当前商用的 Mn⁴⁺ 激活氟化物荧光粉受限于其较大粒径,而现有研究的亚微米级 Mn⁴⁺ 掺杂氟化物荧光粉又普遍存在吸收效率不足的问题。本研究采用具有高激活剂浓度和高吸收效率的 Cs₂MnF₆ 基质,通过乙酸有机溶剂作为反溶剂,成功合成了亚微米级小粒径 Cs₂MnF₆:Si⁴⁺ (简称 CMFS) 荧光粉。进一步通过表面反向阳离子交换处理,构建核壳结构 Cs₂MnF₆:Si⁴⁺@Cs₂SiF₆, (简称 CMFS@CSF),显著提升了材料的发光强度和耐湿稳定性。CMFS@CSF 荧光粉展现出 48.4% 的高吸收效率,平均粒径为 800-900 nm,其发光强度达到未包覆 CMFS 荧光粉的 4.25 倍。经 240 分钟水浸处理后,该材料仍能保持初始发光强度的 75%,彰显出卓越的耐湿性能。此外,在 150°C 高温环境下,荧光粉的发光强度仍能维持初始值的 100%,表现出优异的热稳定性。采用 CMFS@CSF 红色荧光粉封装的白光 LED 器件,其相关色温为 3789 K,显色指数 (Ra) 达 85.7,色域覆盖率达 108.9%。这些结果表明,CMFS@CSF 荧光粉在先进显示技术领域具有广阔的应用前景。

A06-P10

基于牺牲腐蚀法的高效电解海水阳极材料合成及析氧选择性探究

张旭、童丽、刘一蒲、林仕伟*

海南大学

构建高效稳定的电解海水体系对促进氢能经济的发展具有重要意义，而海水中较高的氯离子含量对该体系的长期稳定运行带来了巨大挑战。氯离子不仅对常规的电极基底材料具有较强的腐蚀性，其在阳极端伴随析氯反应产生的副产物(如 ClO^-)也具有强氧化性，进一步加速了电极结构的腐蚀与崩解。此外，临近海水地区的高湿度气氛可能在电极表面产生微酸性腐蚀环境，使得电极在非工况条件下也可能发生腐蚀。针对海水电解体系在工况及非工况下可能发生的电极腐蚀问题，我们推测通过腐蚀法构建腐蚀产物作为催化材料可能有助于缓解腐蚀现象，构建高效的海水电解阳极材料。

基于上述推测，本工作发展了一种牺牲腐蚀法，首先在导电基底上制备 Fe 腐蚀层，再利用 Fe 腐蚀层在镍盐溶液中发生的腐蚀反应来生长富氧空位(Vo)的 NiFe-LDH 纳米阵列。原位 Raman 表征证明该结构在 OER 催化条件下会转变为 γ -NiFeOOH 结构，EPR 结合同步辐射数据表明结构转变后，氧空位浓度提升并且倾向在 Fe 位点周围生成。生长于不锈钢片表面的 NiFe-LDH 阵列在 1 M KOH 溶液达到 10 mA/cm^2 对应的过电势为 232 mV，析氧催化活性优于商业贵金属 IrO_2 ($\eta_{10} = 314 \text{ mV}$)，其在临近海洋的潮湿环境中放置了 3.5 年依旧可以保持催化活性。随后，基于 DPD 分光光度法构建了一种简单的测试流程分析了 IrO_2 和 NiFe-LDH 的析氧选择性，在碱性模拟海水溶液中， IrO_2 在 480 mV 的过电势下即会发生析氯反应，NiFe-LDH 在 700 mV 的过电势下仍未发生析氯反应，证明了富含氧空位的 γ -NiFeOOH 活性相结构具有更佳的析氧选择性。同时，应用该方法在不锈钢网表面制备的 NiFe-LDH 电极可在 10 M KOH 海水溶液中稳定运行 1000 小时以上，证明了其在海水环境中的催化稳定性。基于实验表征结果，采用 DFT 计算探究了其析氧活性及选择性来源，计算结果表明 γ -NiFeOOH 中引入的 Vo 可以通过增强 Ni、Fe 位点对含氧中间体的吸附强度来提升 OER 活性，其中 Fe 位点对 OER 反应具有更低的理论过电势(0.19 eV)。对于 CER 反应而言，Ni 位点具有最低的理论过电势(0.33 eV)，其在吸附 Cl 后会形成负电电荷层，可以排斥其他氯离子的吸附，保护高 OER 活性的 Fe 位点，因此从计算角度证明了该材料的 OER 与 CER 理论电势差的扩展，解释了该结构析氧选择性的来源。该工作为设计高效稳定的海水电解阳极材料提供了新的参考。

A06-P11

氨基-单苯环 Cu 基 MOFs 改性及其电催化 CO_2 还原性能研究

周伟、胡飞、崔接武、吴玉程*

合肥工业大学

电催化二氧化碳还原反应 (CO_2RR) 是实现碳中和与可持续能源循环的关键技术之一，其中将 CO_2 高效转化为高价值的 C_{2+} 产物(如乙烯、乙醇等)备受关注。然而，该反应通常面临高过电位、低选择性及稳定性不足等挑战。金属有机框架 (MOFs) 材料凭借其可设计的孔隙结构、高比表面积及可调控的活性位点，在电催化领域展现出巨大潜力，尤其是铜基 MOFs 材料在促进 C-C 耦合生成 C_{2+} 产物方面具有独特优势。本研究设计并合成了一种基于氨基功能化修饰单苯环配体的新型铜基 MOFs 催化剂，并引入镧(La)元素进行掺杂改性。核心设计在于：首先，采用刚性单苯环配体桥联铜节点，有效缩短了相邻铜活性位点之间的距离，为 C-C 耦合步骤提供了优化的几何构型，显著促进了 C_{2+} 产物的生成路径；其次，配体上精准引入的氨基 ($-\text{NH}_2$) 基团发挥了关键的电子调控作用，氨基作为强电子供体，有效调节了铜活性中心的电子态密度和 d 带中心位置，优化了关键反应中间体(如 $^*\text{CO}$)在铜位点上的吸附强度，提升了反应动力学。最后， La^{3+} 离子的引入，进一步增强了催化性能， La^{3+} 作为强路易斯酸位点，优先吸附并活化 CO_2 分子，同时其独特的电子性质可微调邻近铜位点的局部电子结构，协同氨基的作用，共同优化了活性位点的催化微环境。实验结果表明，La 引入的氨基-单苯环 Cu 基 MOFs 在流动池电解体系中展现出优异的 CO_2RR 性能：在 -2.0 V vs RHE 过电位下，其对 C_{2+} 产物的法拉第效率 (FE) 为 70.3%，同时实现了 57.4% 的烷烃产物 (C_xH_y) 选择性， C_2H_4 的局部分电流密度达 $-127.6 \text{ mA cm}^{-2}$ 。该工作通过配体几何结构设计(单苯环)、

电子结构调控（氨基功能化）及异金属协同（La 引入）三重策略，实现了对 Cu 基 MOFs 催化剂活性位点几何与电子结构的精准调控，为高效定向转化 CO₂ 至多碳产物提供了新的材料设计思路和实验支撑。

A06-P12

“置换加速层”策略实现工业级电流密度下高效水/海水电解

童丽、刘一蒲*

海南大学

开发适用于工业水电解和直接海水电解的高效电催化剂对绿色制氢产业化发展具有重要意义。钌（Ru）基催化剂因其优化的电子结构展现出良好的应用前景，然而现有研究往往忽视了合成过程中 Ru³⁺与过渡金属基底之间的置换反应带来的潜在影响。

本研究首先系统考察了不同过渡金属基底与贵金属离子之间的置换反应对电极性能的可能影响。基于这一认识，创新性地提出了“置换加速层”策略，成功实现了高性能 Ru 基多相纳米颗粒(Ru-FeNiOxHy/NF)的超快速合成。该催化剂在碱性电解液中表现出优异的电催化性能：在 1000 mA cm⁻² 大电流密度下的析氢过电位仅为 196 mV，且在 500 mA cm⁻² 的电流密度下可稳定运行超过 100 小时。进一步研究发现，将 Ru-FeNiOxHy/NF 与 NiFe-LDH 组装成碱性电解池时，仅需 1.75 V 的工作电压即可实现 300 mA cm⁻² 的电流密度，并保持超过 100 小时的长期稳定性。特别值得注意的是，该催化剂在模拟海水环境中同样展现出与碱性介质相当的活性和稳定性。

通过系统的对比实验和表征分析，我们证实了 Ru-FeNiOxHy/NF 的主要催化活性相为金属 Ru，而预先在泡沫镍上生长的氢氧化物层能有效抑制基底与 Ru³⁺之间的不利置换反应。密度泛函理论（DFT）计算表明，Ru-FeNiOxHy 中部分氧化形成的 Ru-O-Ru 亚单元通过电子调控作用优化了氢吸附自由能：Ru 位点向邻近氧原子提供电子以维持结构稳定，这一过程减少了 H*吸附可用的电子密度，从而削弱了氢吸附强度，显著加速了析氢反应动力学。

本工作不仅揭示了置换反应在催化剂合成中的关键作用，还创新性地提出了“置换加速层”策略，实现了自支撑钌基多相催化结构的简易快速制备。该方法具有优异的可扩展性，所获电极材料在工业级电流条件下表现出卓越的性能，为开发适用于实际生产的高效水电解催化剂提供了新思路。

A06-P13

MOF 衍生硒化铁@碳复合材料及其对 H₂O₂ 的高灵敏、高选择性检测

彭帮国¹、蔡金龙¹、崔接武¹、刘家琴²、吴玉程^{*1}

1. 合肥工业大学

2. 北京化工大学

双氧水（H₂O₂）在生物体内既是重要信号分子，又与氧化应激、癌症和神经退行性疾病密切相关。高灵敏检测可揭示其动态变化，助力疾病早期诊断；高选择性检测能排除生物样本中抗坏血酸等干扰物，确保结果准确性。此外，在食品安全、环境监测和药物开发中，精准检测双氧水对保障健康、评估污染和优化治疗至关重要。因此，发展高灵敏、高选择性的双氧水检测技术具有重要科学价值和实际应用意义。针对双氧水的检测通常采用电化学氧化法，通过氧化电流的变化测试双氧水的浓度，然而在该过程中，生物体内与双氧水共存的干扰物易被同步氧化，从而导致测试信号失真。鉴于此，本工作基于双氧水的歧化反应特性，通过设计、合成电催化剂实现对双氧水的电催化还原，以获得还原电流，反馈双氧水的浓度。采用液相辅助合成和水热硒化法，制备了一系列硒化铁@碳复合材料，通过调节不同退火温度以及对催化材料的物相结构，探究了不同价态金属对双氧水催化还原性能的影响规律。当负载量为 0.75 mg cm⁻² 时，硒化铁@碳复合材料在 -0.2 V (vs Ag/AgCl) 时对双氧水检测的灵敏度达到 325 μA·cm⁻² mM⁻¹，线性范围为 10-4000 μmol·L⁻¹，检测极限为 0.5 μmol·L⁻¹，该研究可为高灵敏、高选择性葡萄糖和胆固醇检测奠定基础。

A06-P14**基于金纳米颗粒/膨胀石墨/滤纸的叠层结构高性能柔性 SERS 衬底用于检测农药残留**

韩丰蔓、易圣辉*
深圳北理莫斯科大学

柔性表面增强拉曼散射 (SERS) 衬底相较于刚性 SERS 衬底在检测果蔬表面农药残留时优势显著, 尤其体现在便捷的采样流程和更快的检测速度上。然而, 纸基 SERS 衬底存在金纳米颗粒 (AuNPs) 易在纸张三维结构中无效分散的问题, 导致 SERS 信号增强效果受限。为突破这一限制并实现高性能柔性 SERS 衬底, 本研究提出了一种新型三明治结构: 通过 LiCl 介导的化学增强过程, 将 AuNPs 可控聚集在膨胀石墨 (EG) 表面。EG 不仅能提升目标分子的吸附效率, 还可抑制滤纸造成的信号衰减。通过优化聚集剂浓度, 可大幅增加“热点”密度, 从而显著增强拉曼信号。进一步结合种子生长法制备的大尺寸金纳米星颗粒与小尺寸金纳米球混合体系, 通过材料和结构优化, 进一步提升纸基柔性 SERS 衬底的检测性能。该柔性 SERS 衬底成功应用于农药福美双残留的定性与定量检测, 展现出高灵敏度、优异稳定性、便于存储等特点, 具备实际应用潜力。

A06-P15**激光诱导表面等离子体匹配的贵金属/半导体异质纳米晶定向组装与性能调控**

黄柳*、刘威
广东药科大学

贵金属与半导体纳米晶的组装是提升其在催化、光电子器件等领域性能的重要途径之一, 但其表面长链配体的存在限制了纳米晶间的能量传输效率。本文提出了一种激光调控策略, 利用与贵金属纳米晶表面等离子体共振 (SPR) 吸收峰匹配的激光波长, 引导贵金属和半导体纳米晶的晶面选择性融合与取向生长。通过调控纳米晶的组装过程, 成功实现了结晶良好的纳米晶连接结构, 其缩短的纳米晶间距显著增强了激子-等离子体耦合效应, 形成新的局域电磁场增强结构。通过该方法可以制备出具有均匀贵金属纳米晶嵌入的半导体纳米薄膜及微球结构, 所得材料具有优异的界面结晶性、宽谱 SPR 吸收特性以及高导电性。这一方法为设计高效能量传输的纳米晶组装体系及功能性异质结构提供了新的思路。

仅发表论文**A06-PO01****一种高效合成 CB1 拮抗剂吡啶衍生物的制备方法**

王驰¹、苏玉¹、林惠文*²

1. 中国药科大学
2. 东南大学

我们提出了一种高效合成 CB1 拮抗剂吡啶衍生物化合物 5-(4-氯苯基)-1-(2,4-二氯苯基)-N-(哌啶-1-基)-4,5-二氢-1H-吡啶-3-甲酰胺 (E-6776) 的方法。通过碘离子的循环氧化还原取代作用, 激发电化学 (3+2) C-N 偶极环化, 合成吡啶环化合物 E-6776 的关键中间体, 基于此优化合成 E-6776, 且参与电化学反应过程中使用的碘化盐等试剂均可回收再利用。相比较于现有有机合成方法不足 23% 的产率, 本合成路线能够达到 51%, 该合成路线安全性高、产率高, 为大量安全合成 E-6776 并降低合成成本提供依据和保障。

A06-PO02

柔性多孔压电膜纳米限域催化剂的构筑及其在难降解有机废水处理中的应用

肖启健、雷廷平*

华侨大学

难降解有机废水是水环境治理的重点与难点。传统水净化技术无法对其进行节能高效低成本处理，而压电催化能够利用环境中微小机械振动转化产生的活性氧，将难降解有机物矿化成 CO_2 、 H_2O 等无害物质。但现有压电催化降解研究中存在催化剂回收难、活性位点包埋、额外机械力驱动等问题，不利于其推广应用。本研究提出构筑柔性多孔压电膜纳米限域催化剂的调控思路，采用阵列微针并结合非溶剂诱导相分离法对聚偏氟乙烯（PVDF）溶液进行多孔压电膜制作，通过确定合适溶剂（二甲基亚砜，DMSO）和溶液浓度（10 wt%），制备 250 μm 、500 μm 、750 μm 不同厚度的阵列孔 PVDF 膜；借助光学显微镜和扫描电子显微镜观测，发现扎孔区域有不同类型的微纳米孔（如通孔、单向孔等）；其中具有单向孔且另一端含贯通小孔的 PVDF 压电膜可用于纳米限域催化剂，为解决压电催化剂回收难、提高活性位点暴露率及实现水流驱动压电催化降解提供支撑。