

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

D21-多尺度结晶光电材料及器件
D21-Multiscale Crystalline Electric and
Optical Materials and Devices

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



D21. 多尺度结晶光电材料及器件

分会主席：薛冬峰、陈昆峰、梁风、张一波、李凌云

D21-01

功能材料多尺度多自由度研发

薛冬峰^{*1}、陈昆峰²、王亚男¹

1. 电子科技大学（深圳）高等研究院
2. 山东大学新一代半导体材料研究院

材料的功能起源及其设计制备高度依赖体系物理化学过程。在材料制备热力学上，以铌酸锂晶体、YAG 晶体及透明陶瓷等功能材料体系为研发对象，聚焦研究体系所经历的原子/离子或分子聚集、团簇演变等多尺度动态过程。在材料制备动力学上，基于体系关键自由度控制策略，发展出材料多尺度合成的动力学强化技术。本报告聚焦晶体和陶瓷材料体系的研究，理解功能材料多尺度多自由度的物理化学本质，为发现新型功能材料体系提供参考。

D21-02

光致还原态多铌氧簇晶态材料的合成：D-f-A 电子转移机制

郑寿添^{*}

福州大学

氧化还原性能赋予材料在催化、电子和磁性等方面有广泛的应用。多铌氧簇是一类重要的多酸团簇，然其氧化还原惰性极大限制了其潜在应用。如何实现具有氧化还原性多铌氧簇的合成长期以来是一项富有挑战性的合成研究课题。经过多年合成探索，最近我们率先实现了具有氧化还原性的晶态多铌氧簇的合成，并提出未知的 D-f-A 电子转移机制，为开发丰富多样的氧化还原型晶态多铌氧簇及其潜在的性质性能研究打下基础。

D21-03

大尺寸 Yb:CALGO 超快激光晶体的生长和激光性能研究

王燕^{*}

中国科学院福建物质结构研究所

本工作研究了大尺寸 Yb:CALGO 的多晶料合成和晶体生长工艺，获得一系列不同 Yb³⁺掺杂浓度(0.5, 1.7, 2.5, 5.0, 7.2 和 8.0 at%)的 Yb:CALGO 晶体，最大尺寸达到 $\Phi 50\text{mm} \times 110\text{mm}$ 。对生长出的晶体进行光学质量检测，散射损耗为 $1.796 \times 10^{-3}/\text{cm}$ ，光学均匀性系数为 4.21×10^{-5} 。对 Yb:CALGO 晶体热力学性质和微观光学性能的各向异性性能进行了表征和分析。通过对比不同掺杂浓度 Yb:CALGO 晶体的 XRD 谱图、偏振吸收和发射光谱、吸收和发射截面、荧光寿命以及拉曼光谱等，分析了 Yb³⁺掺杂浓度对 Yb:CALGO 晶体的结构与光谱性质的影响。基于生长的 8.0 at.% Yb:CALGO 晶体，进行了连续和脉冲激光实验，获得最大输出功率为 420 mW、中心波长为 1061.6 nm 的连续激光输出，并通过 SESAM 锁模获得了最大输出功率 35 mW、脉冲宽度 33fs 的中心波长 1061 nm 的脉冲激光输出。

D21-04

自发成核坍塌下降法定向生长

史宏声^{*1}、任国浩²

1. 浙江科技大学
2. 中国科学院上海硅酸盐研究所

自发成核坩埚下降法的晶体生长方向通常是随机的[1]，但在特定生长工艺条件下，钨酸铋钠 $\text{NaBi}(\text{WO}_4)_2$ 晶体在自发成核坩埚下降法生长中却表现[001]向定向生长的特征[2]。而在自发成核坩埚下降法掺铈溴化镧 $\text{LaBr}_3:\text{Ce}$ 晶体生长中，通过晶体生长工艺参数的调节，可以获得特定的晶体生长方向[3]。本文结合晶体结构和晶体生长工艺参数，对此进行了讨论，由于某些晶体难以进行籽晶生长，但又需要定向生长，因此本工作具有一定的现实意义。

D21-05

LiNbO₃ 晶体电弹性能及超声传感应用研究

于法鹏*、王国良、李妍璐

山东大学

水平剪切（SH）超声导波传感器在航空航天、核电能源、水利桥梁等领域的结构健康监测方面有着重要应用。本报告以近化学计量比铌酸锂（NSLN）和同成分铈酸锂（CLN）晶体为主要研究对象，从晶体性能研究出发，进而研制得到用于结构健康监测的高灵敏度 SH0 超声导波传感器。首先，通过压电力显微镜测试、单晶结构解析和第一性原理计算等手段，研究得到高 Li 含量的 NSLN 晶体比 CLN 晶体具有更高的压电活性。其中，NSLN 晶体的压电系数 d_{15} （77.6 pC/N）和 d_{22} （22.8 pC/N）比 CLN 晶体分别提高了 17.4% 和 18.1%。其次，设计得到 NSLN 晶体最优敏感切型 d_{15}' （92.9 pC/N）。最后，基于最优切型研制得到高灵敏度 SH 超声导波传感器原型器件。NSLN 基 SH 导波传感器展现出优异的缺陷定位能力，650 °C 高温条件下其缺陷定位灵敏度高达 16.1 dB。总而言之，LiNbO₃ 晶体是一种性能优异的压电功能材料，在高温传感领域展现出明朗的应用前景。

D21-06

AI 产业的发展促进人工晶体需求的爆发

李来超*

森一量子科技（厦门）有限公司

AI 产业的飞速发展正推动数据中心、高性能计算集群与下一代光子芯片对核心光学器件的需求呈现爆炸式增长。本文聚焦 AI 驱动的光互联技术演进，详细剖析其对铋掺杂钇铁石榴石（Bi:YIG）、钒酸钇（YVO₄）及单晶光纤三类关键人工晶体的深远影响。研究表明，在光隔离器与环形器核心元件、极化态控制和晶体增益介质等高端应用中，人工晶体需求正随 AI 算力迭代而倍增。面对这一技术机遇与产能瓶颈并存的现状，需多方协同探索创新材料生长工艺与器件集成方案，以支持全球 AI 算力爆发需求。

D21-07

口径 100mm 光学级 YCOB 晶体提拉法生长与表征

郑燕青*^{1,2}、刘俊杰²、林霞²、孙志刚¹、姜林文¹、王帅¹

1. 宁波大学材料科学与化学工程学院

2. 厦门钨业股份有限公司稀土光电晶态材料研究所

近年来，世界各国纷纷开展超强超短激光系统开发，强激光峰值功率也由数个 PW（1 PW=10¹⁵ W）向 10 PW 进发，目前国际上提出了多个峰值功率达到 100 PW 乃至 200PW 的激光装置计划，对超大口径（100 mm~400 mm）非线性光学晶体提出了需求。目前符合性能和质量要求的晶体主要包括 KDP（含 DKDP）、LBO 和硼酸氧钙钇（YCOB）晶体。由于前者大尺寸批量生长最成熟，获得了较多的应用，后两者目前尺寸水平远小于前者，但由于更适用于重频系统，其 100 mm 级口径的晶体的需求非常迫切。在这三种晶体中，YCOB 晶体是唯一可采用熔体法生长的晶体，有望大大降低制造成本和周期，且可应用于 0.4~2.4 μm 波段，而且将来也可通过稀土元素掺杂实现宽带倍频，因此人们对该晶体寄予厚望。然而，该晶体对称性低（单斜晶系），且存在三个解理面，熔点高达 1510 °C，使得该晶体生长及定向加工都比较复

杂，光学级大口径晶体制备一直是难点。美国 CPI 公司在 2006 年率先报道了直径 80 mm 的光学级 YCOB 晶体的提拉法生长，并开展了大能量(100 J)倍频验证。2020 年中国科学院上海硅酸盐研究所郑燕青、涂小牛团队报道了融合提拉法和下降法优点的直径 108 mm 的光学级 YCOB 晶体的制备，并切割出 80 mm×60 mm×50 mm 的超大体积元件，在上海交大的 2 mm 中红外 OPCPA 系统成功使用，产生了百太瓦中红外激光，创造了世界纪录。进一步扩大晶体口径时，由于下降法生长过程不可见且晶体受到坩埚物理约束，对于控制解理开裂不利，所以团队又将目光转回到提拉法。以往的实验表明，3 英寸直径 YCOB 晶体生长比较容易，较容易平衡其防止开裂和避免气泡及包裹体的工艺要求，但 4 英寸及以上直径晶体则较难，解理开裂更易发生，工艺可调节窗口较小，完全消除气泡及包裹体需要更多温场结构和工艺的摸索。本工作正是在这一背景下开展的。

本生长实验原料采用固相烧结工艺制备，原料包括碳酸钙、氧化钇和硼酸。提拉法生长设备为具有自动等径控制的真空提拉炉，生长坩埚采用铂，内径为 170mm，提拉速率为 0.4~1.0 mm/h，转速 10~18 rpm。设置晶体总长度为 180 mm，等径部分直径 108 mm、长度 120 mm。晶体经 X 射线衍射仪定向精确到 0.2°以内，后经过研磨和抛光得到测试用元件，其中光学均匀性测试采用 60 mm×60 mm×15 mm 样品。采用激光干涉测定 YCOB 元件光学均匀性。

经过反复的温场结构和生长工艺的实验探索，生长获得了若干无开裂的直径约 108 mm、等径长度约 120 mm 的无包裹体和气泡的高质量 YCOB 晶体。按照倍频角度切割出的 YCOB 晶体元件最大尺寸达到了 100 mm×100 mm×20 mm。光学均匀性采用 60 mm×60 mm 样品，加工单面平整度两面为 0.15λ 和 0.21λ，透过波前为 0.21λ，全口径光学均匀性达到 1.0×10^{-5} 。

本研究工作表明，采用提拉法可制备直径 100mm 以上大尺寸高光学质量的无开裂的 YCOB 晶体，并开启了更大口径 YCOB 晶体提拉法生长的可能性。

D21-08

高质量钇铁石榴石单晶的水热生长研究

王彪*、徐存华、黄丰

中国科学院赣江创新研究院

高功率中红外激光系统在大气监测、激光加工等领域具有至关重要的应用价值，然而其在高功率运行状态下的稳定性却受限于磁光隔离器及磁光材料的滞后发展。钇铁石榴石（YIG）晶体是少数在中红外波段透明的磁光材料之一，其磁光性能卓越、热学性质优良，有望应用于高功率磁光隔离器件，是保障高功率中红外激光系统稳定运行的关键材料。目前，YIG 的不一致熔融特性使得大尺寸、高质量的 YIG 晶体难以制备。针对这一挑战，本课题组提出采用高温高压水热法制备大尺寸 YIG 单晶并开展掺杂改性研究。本报告将从水热晶体生长发展现状出发，着重介绍其在制备非一致熔融复杂氧化物晶体方面的优势和存在的问题，同时也将介绍本课题组在水热法制备 YIG 晶体方面的研究进展。

D21-09

新型电光晶体的设计与探索

何超*

中国科学院福建物质结构研究所

电光晶体通过电场调节材料的折射率，在光电信号的转换与控制中发挥着至关重要的作用，广泛应用于光电子学和激光技术领域。理想的电光晶体应同时具备较高的电光系数和优异的光学透过率，随着技术进步和应用需求的不断增加，对具有卓越电光性能的电光晶体的需求日益迫切。钙钛矿铁电晶体由于氧八面体结构和优异的偶极子迁移能力使其具有较大的电光系数。然而，钙钛矿铁电晶体的应用常常受到光学

透明度降低的限制，这主要是由于光在畴壁处的散射和反射所致。在本研究中，我们采用了一种结构降维策略，设计了一种准二维层状结构 K3Nb3B2O_{12} (KNBO) 晶体。这一改性限制了 B 位离子在层内的迁移，同时保留了沿层间方向的显著自发极化，从而将铁电体中的多极轴转变为单极轴。自发极化方向的变化改变了畴结构，从而最小化了畴壁的散射效应。因此，KNBO 晶体表现出较大的有效电光系数 (50.14 pm/V)，并且在 330 nm 到 250 nm 波长范围内具有超过 80% 的高透过率。这些特性超过了当前商业电光晶体的性能。本研究通过结构设计为提高透明度和电光系数提供了新思路，具有潜在的应用前景，能够推动电光晶体的研究与发展。

D21-10

高性能结晶荧光陶瓷及其 LED 器件

周有福*

中国科学院海西研究院、闽都创新实验室

LED 照明具有高效、节能、环保等优点，作为第四代光源应用越来越广泛。传统 LED 采用荧光粉+高分子胶封装技术，其大功率化突显“散热困难”与“封装失效”等瓶颈，限制了 LED 应用范围。结晶荧光陶瓷固有散热好，耐高温等特性，作为 LED 荧光体较好解决了上述应用瓶颈，业已获得实际应用。随着经济社会的发展，大空间、大照度的照明场合，如港口、机场、海洋渔业等，需求日益旺盛，LED 技术指标越来越高，荧光陶瓷性能也水涨船高。如超大功率（单颗 COB 光源功率大于 1500W ）LED 对荧光陶瓷的散热、光色性能、尺寸提出更高要求。

如何从源头材料入手？掌握其作用机理和构效关系，指导更高性能多晶荧光陶瓷的研制，引领 LED 产业科技发展趋势、推动 LED 产业转型升级具有重要意义。本团队基于前期研究工作和功能基元理论，通过提高陶瓷散热能力和控制其结构缺陷，如引入高导热颗粒、优化烧成工艺等途径，研制了理想微观结构和光色性能的大尺寸荧光陶瓷为 LED 荧光体，同时集成热管理等全链条创新技术，研发实用化超大功率（ 1500W ）LEDs，并应用于海洋集鱼等大空间场合。

D21-11

英寸级茈有机闪烁晶体的溶液法生长与性能研究

徐翔^{*1}、张明荣^{1,2}

1. 福建理工大学

2. 厦门钨业股份有限公司

有机闪烁体茈晶体（反式二苯乙烯）因其优异的中子/伽马射线甄别能力，是一种比较理想的快中子探测材料，在核能安全与高能物理研究领域具有重要应用价值。自 2010 年美国劳伦斯·利弗莫尔国家实验室 Natalia Zaitseva 团队开发了茈晶体溶液法快速生长技术以来，英寸级茈晶体的制备技术及其应用研究持续取得突破。目前，茈晶体已在航天器载中子谱仪、中子阵列成像等领域展现出良好的应用前景。然而，国内关于溶液法茈晶体生长的研究相对滞后，尚未攻克英寸级茈晶体制备的关键技术。本工作开展了茈晶体生长工艺的系统研究，包括高纯原料合成、溶剂体系筛选和生长参数优化，成功研发了基于溶液法的英寸级茈晶体生长工艺，制备出具有完整晶型的大尺寸高品质茈晶体。闪烁性能测试表明所制备的茈晶体在光产额、衰减时间、中子-伽马甄别性能等关键指标上均表现优异，满足快中子探测应用的要求。本工作在国内外首次实现英寸级茈晶体的溶液法可控制备，为我国自主制备用于中子探测的高性能大尺寸茈有机闪烁晶体奠定了基础。

D21-12

有机-无机杂化光电材料研究

饶成*

利用溶剂热法制备 CdS 量子点，并将其湿浸渍于石墨相氮化碳表面，成功合成有机-无机杂化光电材料。该有机-无机杂化光电材料，拓宽了单一相的光吸收范围、加大了内建电场强度；并且因其独特的界面能够定向分离光生电荷，提高了光生载流子的分离效率，进而显示出良好的光电转化效率。

D21-13

金属卤化物钙钛矿团簇的精准合成、光学性质及其稳定性研究

徐珂¹、钱彬彬¹、张睿谦²、王亚男¹、陈昆峰³、郎亚宁¹、薛冬峰^{*1}

1. 电子科技大学（深圳）高等研究院
2. 中国科学院深圳先进技术研究院
3. 山东大学

金属卤化物钙钛矿（MHPs）因其优异的光电特性在光电子领域展现出巨大潜力。作为 MHPs 材料体系中连接微观与宏观尺度的关键中间体，钙钛矿团簇（PMSCs）具有独特的量子限域效应和表面效应，兼具大比表面积、可溶液加工、低成本等独特优势，是研究 MHPs 稳定性和表面缺陷问题的理想模型。本研究针对多尺度钙钛矿团簇体系，通过精准调控反应前驱体浓度与反应动力学，采用表面配体工程、离子掺杂和核壳结构设计相结合的方法，实现了钙钛矿团簇的精准合成与光学性质和稳定性的精准调控，改善了钙钛矿团簇存在的单分散性不足导致发光均一性差、铅基材料生物毒性风险、环境稳定性差及光谱局限性等关键问题。通过引入表面配体协同调控策略，实现原子尺度精准钝化表面缺陷，调控带边态密度；利用金属离子掺杂，精确调节激子束缚能与载流子寿命；设计梯度能带结构的壳层包覆，提升材料环境稳定性与光致发光荧光量子效率。本研究为构建钙钛矿团簇量子发光材料，突破精准制备技术，推动其在光电领域如高灵敏度生物传感、近红外光通信、高动态范围显示等典型光电场景的应用提供了理论支持与技术借鉴。

D21-14

基于化学键电负性调控的铌酸锂体系体积模量计算与低压压缩性材料设计

王亚男¹、陈昆峰^{1,2}、薛冬峰^{*1}

1. 电子科技大学（深圳）高等研究院
2. 山东大学

在微机电系统（MEMS）、压力传感器等前沿功能器件领域，材料的体积模量（B）作为衡量抗压缩变形能力的核心参数，直接影响器件的力学稳定性与传感精度。铌酸锂（LiNbO₃）材料体系因兼具优异的铁电、压电性能，成为高模量功能材料的研究热点，但对其体积模量调控机制的理解仍待深化。本研究基于化学键电负性与压缩性能关联模型，系统探究 LiNbO₃ 基体系的体积模量调控规律与构效关系。系统研究了 LiNbO₃、LiTaO₃ 及其衍生体系的键合特性与压缩性能调控机制。研究表明：（1）本征 LiNbO₃ 和 LiTaO₃ 的体积模量差异（215.98 vs 221.24 GPa）主要源于 Ta-O 键更高的电负性（ $\Delta\chi=0.07$ ）和更低的离子性畸变（ $\Delta f_e=0.01$ ），展现更强抗压能力；（2）Li 空位缺陷通过降低 Li-O 键占比，强化离子性主导的 Nb-O 键网络强化 Nb-O 离子键网络，致使 B 值随空位浓度呈指数衰减；（3）LiNb_xTa_{1-x}O₃ 固溶体中，Ta 元素梯度引入提升 M-O（M=Nb/Ta）键平均电负性，优化晶格畸变与电子云分布，实现体积模量的正向调控。本研究首次将电负性调控理论拓展至非立方钙钛矿型铁电氧化物体系，定量解析阳离子电负性梯度与多键协同效应对体积模量的调控机制，为高性能铁电材料成分设计与力学性能优化提供理论框架，对开发兼具高模量与低压压缩性的功能器件材料具有重要指导意义。

D21-15

厘米级锰基杂化金属化合物单晶：晶体生长规律与蓝光发射起源

张琪、李凌云*、于岩
福州大学

有机-无机杂化金属卤化物(OIMHs)晶体凭借其可调控的能带结构和模块化晶体结构设计优势,在发光器件、光学传感、信息存储等领域展现出广阔的应用前景。其中,四苯基溴化磷锰溴化物($C_{24}H_{20}P-MnBr$)作为典型代表,虽表现出显著的光致发光和激子行为,但厘米级单晶的可控生长仍存在重大技术瓶颈。这一缺陷不仅阻碍了对其本征光物理机制的深入解析,更制约了其在辐射探测等领域的器件化应用及闪烁性能优化研究。

针对这一技术瓶颈,本研究开发了定向籽晶辅助溶剂挥发法,成功制备出尺寸达 $4.2 \times 1.8 \times 0.5 \text{ cm}^3$ 的 $C_{24}H_{20}P-MnBr$ 单晶。X 射线摇摆曲线半高宽仅 0.05° ,证实了其结构完整性。值得注意的是,该单晶表现出明显的各向异性光学响应:通过偏振分辨荧光光谱证实其晶体学主轴与光学主轴存在 2.5° 夹角,当电场矢量平行于光学主轴时,绿光发射强度最强,这为开发偏振敏感型光电探测器提供了新思路。利用该大尺寸单晶首次观测到紫外线激发的蓝光发射带($\lambda_{em}=400 \text{ nm}$, FWHM=32.9 nm),此现象在前期多晶研究中被完全遮蔽。通过时间分辨荧光光谱与变温发射光谱分析,首次揭示 $C_{24}H_{20}P-MnBr$ 存在 Mn^{2+} 与有机配体的协同发光机制:短寿命蓝光发射($\lambda_{em}=400 \text{ nm}$, $\tau=0.21 \text{ ns}$): 归属为有机配体 $C_{24}H_{20}P^+$ 的 $S_1 \rightarrow S$ 辐射跃迁;长寿命绿光发射($\lambda_{em}=519 \text{ nm}$, $\tau=0.39 \text{ ms}$): 源于 Mn^{2+} 的 ${}^4T_1 \rightarrow {}^6A_1$ 自旋禁阻跃迁。实验测得单晶的光致发光量子产率(PLQY)达 100%,相较于多晶样品提升近 1.5 倍。

本工作发展出籽晶辅助结晶策略,成功实现 $C_{24}H_{20}P-MnBr$ 单晶厘米级制备,该方法作为有机无机杂化体系单晶生长的普适性策略,其推广价值不仅体现在 Mn 基卤化物体系,更可为具有金属多面体结构基元的杂化材料提供技术模板。实验证实大尺寸单晶样品能够有效抑制晶界散射效应,为揭示杂化金属卤化物的隐匿激发态行为(如自陷态激子的声子耦合过程)提供理想平台,显著推进了对此类材料本征发光动力学(特别是缺陷介导的非辐射复合路径)的理解深度。

D21-16

薄膜铌酸锂的先进晶化方法及其器件应用

杨荣邦*

山东大学新一代半导体材料研究院

铌酸锂($LiNbO_3$)因其优异的压电、电光和非线性光学特性,在光子集成和传感领域备受关注。系统总结了铌酸锂薄膜的先进制备技术及其在器件应用中的关键进展。铌酸锂具有显著的铁电性能,其独特的晶体结构使其可以发生显著的自发极化,其优异的电光和压电性能,在电光调制、传感和声学等领域发挥着重要的作用。薄膜铌酸锂(TFLN)由于其独特的物理性质、稳定的性质和易于加工等优点而备受关注,介绍了 TFLN 的几种主要制备方法,包括化学气相沉积(CVD)、分子束外延(MBE)、脉冲激光沉积(PLD)、磁控溅射和 Smartcut 技术的发展及前景,介绍了 TFLN 器件,特别是最近在传感器、存储器、光波导和电光调制器等方面的研究。铌酸锂薄膜的制备技术革新与器件设计优化为其在下一代光电子与射频系统中的广泛应用奠定了坚实基础,尤其在 5G 通信、物联网和量子技术领域具有重要战略价值。

D21-17

单原子 W 路易斯酸位点提高催化剂丙烷氧化活性

王怀远、张一波*

中国科学院赣江创新研究院

催化燃烧是工业上消除丙烷的主要方法。为了通过最大化铂和酸性位点之间的相互作用来破坏丙烷分子中的 C-H 键来提高丙烷燃烧活性,将单原子 W 和 Pt 纳米颗粒同时加载到 Al_2O_3 上。其中单原子 W

处于配位不饱和状态，并表现出更多和更强的路易斯酸性。 Al_2O_3 载体上均匀的 Pt 纳米颗粒和单原子 W 协同增强了丙烷完全氧化的催化活性。原位红外研究证明，单原子 W 上的路易斯酸吸附丙烷并更快地将其转化为关键的中间体烯烃或烯烃醛物种，然后逐渐氧化成碳酸盐和二氧化碳。这项作为金属位点和酸位点协同增强丙烷燃烧活性提供了一种新的设计策略。

D21-18

通过光热协同催化增强 $\text{MoWO}_x/\text{CeO}_2$ 纳米棒催化剂在 $\text{NH}_3\text{-SCR}$ 反应中的抗硫性能

韩新宇、刘凯杰、张一波*

中国科学院赣江创新研究院

铈基催化剂在氨选择性催化还原氮氧化物 ($\text{NH}_3\text{-SCR}$) 的实际应用中面临低温活性不足和易受 SO_2 中毒的显著挑战，而本研究创新性地将光热催化应用于 $\text{MoWO}_x/\text{CeO}_2$ 催化剂的 $\text{NH}_3\text{-SCR}$ 反应，实现了低温性能和抗 SO_2 能力的显著提升——在光热条件下，催化剂在 200°C 、 250 ppm SO_2 存在时仍能将 NO_x 转化率维持在 90% 以上；综合表征显示，光辐照促进了催化剂表面氧空位形成、削弱了 NO 吸附，表明反应遵循 Eley-Rideal (E-R) 机理，进而赋予其优异低温活性，同时光热条件降低了 SO_2 化学吸附强度、抑制了硫酸铵生成；密度泛函理论 (DFT) 计算进一步表明， MoWO_x 的窄带隙促进了光激发下电子从 O 2p 轨道向 Ce-O-Mo (W) 界面处 Ce 4f 轨道的转移，使活性位点电子富集并抑制 SO_2 氧化。本研究不仅为提升 $\text{NH}_3\text{-SCR}$ 性能提供了新策略，更在低温高效抗 SO_2 催化剂设计领域实现突破性进展，通过光热协同调控催化剂电子结构与表面吸附行为，为解决工业废气处理中低温脱硝及抗硫中毒难题开辟了新路径，有望推动环保催化技术在复杂工况下的实际应用。

D21-19

低温等离子体在冶金和材料多尺度设计中的应用研究

梁风*

昆明理工大学

低温等离子体具有能量集中、热性能高、化学活性高、冷却速率快、反应条件可控、环境友好等特性，可广泛应用于冶金、材料制备与改性等领域。在等离子体冶金中，由于氢等离子体中包含高温电子、氢离子 (H^+ 、 H^{2+} 、 H^{3+} 、 H^-)、基态和电子激发态氢原子及氢分子，常采用氢等离子体对金属进行熔炼提纯，这是利用氢等离子体高温特性和高能离子和电子的轰击作用，实现金属的快速加热、熔化及精炼，进而对杂质深度脱除。本课题组通过确立电弧等离子体放电过程中电极温度的准确测量方法，揭示了氢电弧等离子体的粒子能量、流场分布等热力学特性，为等离子体冶金奠定科学基础。目前已系统研究的金属包括钨、钼、钛、钒、铌、钽等，提纯效果显著，主要杂质元素去除率 >80%。在材料制备过程中，电弧等离子体作为高温热源使固体熔化、气化或提供促进化学反应的活性粒子，实现材料的高效制备。本课题组构建了热等离子体作用下材料的“微观离子成键-介观团簇演化-宏观形貌调控”跨尺度生长模型，实现了对碳纳米管、碳纳米角、镍粉、钛粉、氮化钛、氮化锆和氮化钨以及硼化铁、硼化镍、硼化钒和硼化钴纳米颗粒的高效制备。等离子体改性材料是利用等离子体中高活性电子、离子和亚稳态、激发态等粒子以及红外线等各种光辐射与材料作用，实现掺杂、刻蚀、表面清洁、界面聚合等物理化学反应，从而达到对材料多尺度改性的目的。研究发现高活性冷等离子体可突破电极材料常规设计的热力学极限，实现氧空位浓度、离子迁移通道、原位界面层的多尺度协同调控与构筑，进而突破了高密度活性位点构筑与电子/离子快速传输通道的协同优化，从而提高电极材料的电化学性能，使得电化学储能器件的能量密度或功率密度得到大幅度提升。以上研究成果对低温等离子体行业发展具有多维度的推动作用，同时为推动冶金行业的技术进步和产业升级以及材料学科的发展意义重大。

D21-20

低维铁电材料及器件物理

刘富才*
电子科技大学

铁电材料因具有外加电场可调的自发极化，在光电转换器件、存储器件以及类脑智能器件等方面有着广泛的应用。如何在低维尺度获得优异性能的铁电材料成为当前铁电领域的研究热点。二维材料由于其独特的结构为研究在低维尺度下的铁电物性及器件提供了理想材料体系。在本次报告中，我将介绍近期在二维尺度下铁电材料及器件物理研究进展，包括铁电离子耦合效应、层数依赖的铁电特性、优异的铁电抗疲劳特性等，以及这一新型铁电体系在信息器件应用方面的探索。

D21-21

弛豫铁电单晶 PMN-PT 中弹性二次谐波的低频磁场调控

庄鑫*
中国科学院空天信息创新研究院

本研究探索了弛豫铁电单晶 PMN-PT 中的弹性二次谐波 (SHG) 响应及其磁调谐特性。弹性 SHG 现象指在频率为 f 的激励频率下，铁电材料产生频率为 $2f$ 的弹性波，其非线性应变响应可通过压电瑞利方程描述。对方程进行傅里叶展开，通过分析其中可逆压电系数与时间和振幅相关项，可分离出一次与二次谐波分量。

针对准同型相界 (MPB) 组份左侧的 Mn 掺杂 (011)-Pb(Mg $_{1/3}$ Nb $_{2/3}$)O $_3$ -PbTiO $_3$ (Mn: PMN-PT) 单晶，我们在高于三方-四方相变温度 (90 °C) 且低于四方-立方相变温度 (106 °C) 的区间内对极化后的晶体进行退火处理，选择性退化三方相微区，同时保留四方相微区的极化状态。测试结果表明，晶体的弹性系数、机械品质因数与激励电压之间的非线性关系在退火后显著增强。

在此基础上，制备了由 PMN-PT 单晶与 Fe 基非晶合金 (FeSiB) 组成的层状三明治磁电复合结构，使用亥姆霍兹线圈施加低频磁场，结合信号发生器、放大器及解调放大电路，表征了二次谐波信号的磁场响应特性。实验结果表明，在较低水平的激励电压 (0.1 V) 下，二次谐波强度由时间相关项与振幅相关项共同决定；当激励电压升高至 0.5 V 时，振幅相关项成为主导因素。在 75.6 kHz 频率处，SHG 信号的磁场调谐能力从 10 mV/nT 提升至 54.8 mV/nT，但边带-载波比由 -34 dB 降至 -50 dB。激励信号强度的增加会抑制磁场对 SHG 载波信号调谐能力。通过差分激励、电流解调模式与 2000 倍的信号放大电路，磁电复合结构在 1 Hz 频率附近能够实现 90×10^6 V/T 的磁场转换系数。

本研究通过退火工艺调控 PMN-PT 单晶的弹性非线性响应，并结合磁电复合结构实现 SHG 信号的高效磁场调谐，揭示了铁电材料微结构演变对非线性弹性响应的调控机制，为磁控声波器件、低频磁场传感器及能量转换器件的设计提供了一种新思路。

D21-22

硼酸盐晶体产生高功率深(真空)紫外激光

玄洪文*
广东大湾区空天信息研究院
中国科学院大学

激光诱导击穿光谱、半导体晶圆缺陷检测、电池极耳焊接等科研和工业应用领域对高功率固态深紫外光源有极大需求。硼酸盐晶体中六硼酸铯锂 (CsLiB $_6$ O $_{10}$, CLBO) 晶体在深紫外区具有走离角小、可生长为大体块、深紫外区有效非线性系数高的优势在高平均功率、高光束质量的固态深紫外激光产生方面发挥了重要的作用，成为实现高功率高稳定性固态深紫外激光的优良非线性光学晶体。其吸收截止波长短至

~180 nm, 通过光学和频的方式可重要的光刻波长 193 nm。三硼酸锂 (LiB_3O_5 , LBO) 是我国发明的系列硼酸盐非线性晶体之一, 其吸收截止波长可短至~160 nm, 也可通过和频产生波长 200nm 以下的深(真空)紫外激光。

使用国产商用 CLBO 晶体, 以 532 nm 激光作为基频, 在泵浦功率为 35 W 时, 通过 CLBO 晶体($5\times5\times20\text{ mm}^3$) 进行非线性频率变换, 获得了最高平均功率为 14 W 的 266 nm 激光输出, 转换效率最高为 41%。另外, 利用自制的 Yb:YAG 晶体放大器产生 1030nm 激光。这束激光分为两部分: 一部分经过四次谐波发生, 产生输出功率为 1.2W 的 258nm 激光; 另一部分则通过光参量放大器, 产生输出功率为 700mW 的 1553nm 激光。利用级联 LBO (LiB_3O_5) 晶体, 258nm 与 1553nm 经两次和频, 产生所需的 193nm 激光, 平均功率达到 70mW, 线宽小于 880MHz, 重复频率为 6kHz。这是目前使用 LBO 晶体产生的 193 nm 激光最高功率。在混频之前为 1553nm 波长的光束引入了螺旋相位板, 从而产生了携带轨道角动量的涡旋光束。通过 CLBO 或 LBO 晶体还产生了波长从 193 nm 至 266 nm 系列高功率深紫外波长激光。这将为光刻、半导体检测、激光加工、光谱分析和高分辨测量等应用提供高品质深紫外光源。

D21-23

梯度控温热压法制备钙钛矿异质结晶圆及其自供电 X 射线探测性能研究

张悦¹、孙元杰^{1,2}、刘哲²、李志刚^{1,2}、赵弘韬^{*1,2}

1. 哈尔滨工程大学

2. 黑龙江省原子能研究院

自供电探测器因其无需外接电源的特性, 在便携式医疗诊断与工业无损检测领域具有独特价值。但多晶钙钛矿晶片固有的晶界缺陷与体相杂质加剧载流子非辐射复合, 晶圆结晶质量差导致的光学不均匀性, 严重制约探测器的探测性能与稳定性。本研究采用梯度控温双向压制多晶片的工艺, 制备出界面清晰的 $\text{MAPbCl}_3/\text{MAPbBr}_3$ 透明异质结晶圆。以此构建的 $\text{Au}|\text{MAPbCl}_3/\text{MAPbBr}_3|\text{Au}$ 平面器件在零偏压下实现高效自供电探测: X 射线灵敏度达 $782.26\text{ }\mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1}\text{ cm}^{-2}$, 检测限低至 $57\text{ nGy}_{\text{air}}\text{ s}^{-1}$ 。机理分析表明, 异质结内建电场在光照下驱动载流子定向分离, 同时在暗态环境下有效抑制电荷复合。该成果为钙钛矿自供电 X 射线探测器提供了可行的晶圆制备途径。

D21-24

多功能稀土光电材料研发及应用

周亮*

Changchun Institute of Applied Chemistry, Chinese Academy of Sciences

2021 年组建“稀土光电材料与器件”课题组, 主要从事有机光电材料设计合成、有机光电器件开发、稀土配合物生物医学应用、工艺优化及工艺装备研发, 累计承担各类科研项目 30 项, 建成包含 500 平米办公室、800 平米精细合成实验室、1200 平米千级超净间(局部百级)及三十余台大型仪器的“稀土光电材料与器件”中试研发基地。近年来, 主要研究成果有: 1. 在理论研究基础上, 设计合成了上百种新型有机光电材料, 深入研究其光物理及电化学性能, 并探索其在光电器件及生物医学领域的应用; 2. 依据稀土配合物特性, 国际首创“稀土敏化 OLEDs”设计理念, 并进一步开发梯度掺杂稀土敏化 OLEDs, 大幅提高器件综合性能; 3. 优化工艺路线及核心部件、开发超快响应监控系统, 成功研制出智能型有机小分子材料真空升华提纯设备(实验型、中试型及量产型)、全自动 OLED 面板制备及封装设备(实验型及中试型)。研究成果在 *Light: Science & Applications*, *Adv. Mater.*, *Chem. Sci.* 等杂志上发表第一/通讯作者论文 168 篇; 申请发明专利 76 项(含 PCT 7 项、国际发明专利 15 项), 已获授权发明专利 47 项(含国际发明专利 14 项)。

D21-25

弱电流辅助大气污染物催化消除及强化机制

张一波*

中国科学院赣江创新研究院

随着电能的逐渐绿色化及电力成本的降低,实现催化剂的实用型电气化将会促使催化甚至整个工业领域的巨大绿色化、经济化及智能化变革。相比传统热催化,电流辅助催化策略是一种采用更少能耗实现更高性能的新途径,颠覆了部分热催化领域的传统理念,其实用性强的特点有望开启催化剂新电气化时代。随着未来在技术、材料和机理多角度深入研究的推进,电流辅助催化在催化工业的使用占比将逐渐扩大,可在大气污染物治理(NO_x 消除, VOCs 净化等),全球能源大规模绿色转型和碳中和的实现进程中起到重要的推动作用。

D21-26**柔性有机晶体管的光敏半导体薄膜调控与界面工程**

尹志刚*

重庆大学,电气工程学院/输变电装备技术全国重点实验室

面向后摩尔时代的低能耗、智能化电子设备需求,发展高稳定的柔性低电压有机薄膜晶体管(OTFT)材料及器件具有重要意义。经过多年研究积累,我们团队发展了高电容、高稳定固态聚电解质功能复合策略,设计开发了一系列本体、双层和三明治结构复合的固态聚丙烯酸类介电薄膜新材料,大幅降低柔性 OTFT 的能耗、提高器件稳定性以及探索在感存算领域的应用潜力。本次报告主要介绍我们结合该类聚电解质介电薄膜,设计将聚苯乙烯绝缘材料引入 p 型聚合物半导体,构建可溶液加工的新型半导体纳米异质结构薄膜,实现高光透、稳定和优良的电荷输运能力。利用它们作为半导体沟道层构筑柔性 OTFT,在 -0.5 V 低电压下迁移率大幅提升至 $6.78 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$,且具有优越的光稳定性和超 450 天的超长空气稳定性。最近,我们还通过紫外光固化技术设计了一系列紫外光交联季戊四醇五/六丙烯酸酯(c-DPHA)介电薄膜,研究发现 c-DPHA 薄膜中的极性羟基官能团可作为与 PIDT-BT 半导体之间的界面陷阱,有效调控载流子的分离与复合过程,使得相应柔性 OFET 能够模拟生物突触功能。通过调控光脉冲和电脉冲参数,开发的 OFET 光电突触展示出良好的双脉冲易化行为,并实现从短时记忆向长时记忆的转换、低突触权重更新非线性度以及非易失性记忆等特性。由此构筑的柔性 OFET 突触阵列可应用于神经形态计算领域,实现对特定字符记忆与遗忘功能的仿生视觉系统,为后续高性能柔性电子集成器件、智能传感终端等应用发展提供了有益思路。

D21-27**热等离子体多尺度冶金与材料制备应用研究**

张达*

昆明理工大学

热等离子体具有能量集中、热性能高、化学活性高、冷却速率快、反应条件可控、环境友好等特性,可广泛应用于冶金、材料制备与改性等领域。在等离子体冶金中,由于氢电弧等离子体中包含高温电子、氢离子(H^+ 、 H_2^+ 、 H_3^+ 、 H^-)、基态和电子激发态的氢原子及氢分子,因此,通过利用氢电弧等离子体高温特性和高能离子和电子的轰击作用,实现对金属的快速加热、熔化及精炼,进而对杂质深度脱除。本课题组通过确立电弧等离子体放电过程中电极温度的准确测量方法,揭示了氢电弧等离子体的粒子能量、流场分布等热力学特性,为等离子体冶金奠定科学基础。目前已提纯的金属包括钨、钼、钛、钒、铌、钽等,提纯效果显著,主要杂质元素去除率 $>80\%$ 。在材料制备过程中,电弧等离子体作为高温热源使固体熔化、气化或提供促进化学反应的活性粒子,实现对材料的高效制备。本课题组构建了热等离子体作用下材料的“微观离子成键-介观团簇演化-宏观形貌调控”跨尺度生长模型,实现了对碳纳米管、碳纳米角、镍粉、钛粉、氮化钛、氮化锆和氮化钨以及硼化铁、硼化镍、硼化钒和硼化钴纳米颗粒的高效制备。综上所述,电弧等离子体为冶金行业实现“双碳”目标提供了创新路径,为解决高端制造“卡脖子”问题等方面具有

战略意义。

D21-28

稀土掺杂氧化镓薄膜的光电性质初探

林日成*、黄舜泽

中国科学院赣江创新研究院

受到超高功率电子器件和日盲紫外探测应用需求的推动，氧化镓 (Ga_2O_3) 凭借其超宽带隙、高本征击穿场强和显著的紫外线吸收而成为一种极具前景的候选材料。然而，基于同价元素替代实现带隙调谐的掺杂工程的缺乏，限制了 Ga_2O_3 在器件中的发展。IIIB 族的镧系元素由于其具有高吉布斯自由能，在环境中表现出与氧原子的强烈键合趋势。在本项工作中，我们通过 PVD 的方法成功制备了镧系元素掺杂的 Ga_2O_3 薄膜，实现了针对 Ga_2O_3 材料的光学带隙调制。基于 $\text{Ga}_2\text{O}_3:\text{Lu}$ 薄膜制备的 ITO/ $\text{Ga}_2\text{O}_3:\text{RE}/\text{Au}$ 结构的垂直型紫外光电探测器实现了 10^{-13} 数量级的超低暗电流，展现出电荷平衡的掺杂策略在光电探测领域的应用前景。

D21-29

钙基共掺杂氧化锆陶瓷材料的机械性能和抗低温老化性能研究

冯亚南*

福州大学

氧化锆材料因其优异的力学性能和化学稳定性，在齿科修复等医学领域得到了广泛应用。低掺杂的四方相氧化锆陶瓷由于相变增韧机制表现出较高的韧性，但在使用过程中长期暴露在潮湿环境中，容易发生四方相氧化锆陶瓷转变为单斜相，导致其力学性能降低。本研究基于反共沉淀-水热法，制备了一系列超细钙钇共掺杂氧化锆粉体，通过无压烧结工艺制备了同时具有高力学性能和高抗低温老化性能的氧化锆陶瓷材料。通过研究无压烧结过程中烧结温度对致密化过程和晶粒生长过程的影响，优化了烧结工艺。其中，低掺杂的 $2\text{CaO}-0.5\text{Y}_2\text{O}_3\text{-TZP}$ 同时表现出较高的力学性能和抗低温老化性能。用大离子半径的 Ca^{2+} 替换小离子半径的 Y^{3+} ，能够在不牺牲机械性能的前提下提升钙钇共掺杂氧化锆陶瓷的抗低温老化性能。

D21-30

零维发光金属卤化物的光学性能设计及应用研究

张伟^{1,2}、郑伟¹、李凌云²、陈学元*¹

1. 中国科学院福建物质结构研究所
2. 福州大学材料科学与工程学院

金属卤化物发光材料具有优异的光学性能和易于溶液法加工的特点，是目前普遍看好的新一代光电半导体材料，在太阳能电池、发光二极管、光电探测等领域具有广泛的应用前景。如何设计高效、稳定且环境友好的金属卤化物发光材料与器件是当前国际前沿研究热点，也是该类材料能否获得实际应用的关键。近年来，我们致力于新型金属卤化物发光材料的光学性能设计、激发态动力学及应用研究。例如，通过 $\text{Bi}^{3+}/\text{Te}^{4+}$ 共掺杂 Cs_2SnCl_6 微晶，获得单一基质双带可调谐高效白光 (PLQY: 68.3%) 及其 LED 器件，并揭示其发光来源于 $\text{Bi}^{3+}/\text{Te}^{4+}$ 的 $^3\text{P}_{0,1} \rightarrow ^1\text{S}$ 电子跃迁^[1]；发展了一种 Te^{4+} 掺杂 Cs_2SnCl_6 多光子吸收上转换纳米晶，实现 Te^{4+} 的七光子吸收上转换发光和低阈值的三光子自发辐射放大^[2]；开发了一类兼具高效发光 (PLQY: 99.5%) 和抗热猝灭 ($I_{150\text{ }^\circ\text{C}} = 84.1\%$) 的有机-无机杂化锰溴化物 $(\text{MTP})_2\text{MnBr}_4$ ，并将其应用于白光 LED 器件和 X 射线闪烁体^[3, 4]。这些研究为金属卤化物发光材料的激发态动力学基础研究提供了新发现，也为新型高效零维发光金属卤化物的光学性能设计及光电应用提供了新思路。

参考文献: 1. W. Zhang, W. Zheng*, L. Y. Li* and X. Y. Chen* et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61,

e202116085.2. W. Zhang, W. Zheng*, L. Y. Li*, X. Y. Shang* and X. Y. Chen* et al., ACS Nano 2025, DOI: 10.1021/acsnano.5c05992.3. W. Zhang, W. Zheng*, L. Y. Li* and X. Y. Chen* et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309230.4. W. Zhang, W. Zheng*, L. Y. Li* and X. Y. Chen* et al., Adv. Mater. 2024, 36, 2408777.

D21-31

团簇基磁性材料构效关系研究

庄桂林*

安徽师范大学

课题组研究在传统数值方法（不可约张量矩阵对角化方法、量子蒙特卡罗方法）的基础上，发展出针对低核与高核团簇磁性参数的系统模拟策略，成功构建了团簇磁性智能模拟平台，并应用到四个方面：模拟高核稀土-过渡金属团簇以及高核稀土团簇磁性，揭示空间限域对簇间磁性传递以及磁各向异性影响机制；利用平均场近似理论，耦合量子蒙特卡罗方法系统建立对超低温磁制冷材料相变温度预测模型并经过实验验证；耦合不可约张量算符数值模拟和密度泛函理论方法，从多维度上系统且深入地研究团簇双交换作用对价态互变、磁电耦合等相变影响机制；耦合从头算 DFT 方法，揭示团簇基材料自旋动力学（磁交换、磁各向异性、自旋序等物性）对电催化性能的影响机制。

D21-32

杂化金属卤化物光学晶体中有机阳离子的发光动力学

李凌云*

福州大学

有机无机杂化金属卤化物（OIMHs）作为一类新兴的光学材料，近年来成为领域内的热点研究对象。金属中心与卤素间丰富的配位方式以及金属-卤素多面体与有机配体间多样化的弱相互作用赋予 OIMHs 晶体材料变化多端的光学特性，并在发光显示、防伪、探测等领域展示出良好的应用前景。发光动力学研究是 OIMHs 晶体在光学领域的核心研究内容之一。由于是一种新兴的光学材料，人们对于 OIMHs 晶体发光动力学的研究尚处于发展阶段，尤其是对于晶体中发光中心的认识尚有一定局限性，主要挑战来自于以下两方面：1，对于自限激子（STE）的认识不清以及过度使用；2，缺少认识有机阳离子发光动力学过程的有效物理模型。

我们提出了有机阳离子光致发光的位型坐标模型。在 OIMHs 晶体中，具有光活性的有机阳离子在电学层面高度局域化，但是仍参与晶格的集体振动，相邻有机阳离子之间作用势对电子的量子化运动具有微扰作用。基于此，在我们提出的有机阳离子光致发光位型坐标模型中：（1）有机阳离子的电子能级轮廓形状与其空间构型偏离平衡状态程度大小有关。 Q 代表有机阳离子某能态的平衡状态，在该状态时能量最低。每个能级都有自己的平衡空间构型状态，且可能具有多个不同的平衡状态；（2）在有机阳离子的某一确定能级中，当其空间构型偏离平衡位置时能量上升，从而使整个能级的轮廓在 Q 空间呈现抛物线型；（3）晶格集体振动对于有机阳离子的微扰作用可用子能级描述。由于晶格振动的微扰作用，有机阳离子的能级实际上将分裂为诸多不连续的子能级，用 E_n 标记。

我们基于该模型成功解释了系列 OIMHs 晶体的光致发光动力学过程。在这些 OIMHs 晶体中，由于使用了有机阳离子的位型坐标模型，无需引入 STE 即可清楚解释晶体的光吸收与光发射过程，证明了该模型的合理性。

D21-33

Mechanism of Enhanced Electrical Resistivity in Tantalum-Containing Piezoelectric Crystals and the Modulation Design

Yanlu Li*, Fapeng Yu, Xian Zhao
Shandong University

Piezoelectric crystals are extensively employed in sensing technologies, yet their intrinsic low resistivity at elevated temperatures poses a critical challenge, significantly hindering their application in high-temperature environments. It is found that Ta-containing piezoelectric crystals possess higher resistivity than their Nb-containing counterparts, but the underlying mechanisms driving this difference remain unclear. Herein, we propose a novel electron relaxation mechanism that highlights the 5d orbital hybridization induced efficient electron trapping in antisite defects through a comparative analysis of $\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_{14}$ (LGT) and $\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_{14}$ (LGN) crystals. Our study reveals that the extensive spatial delocalization of Ta-5d orbitals strengthens hybridization with O-2p orbitals, significantly increasing the crystal field splitting energy and deepening the TaGa polaron potential well, which collectively elevate the excitation energy for electron release, accelerate the carrier recombination, and ultimately suppress electrical conductivity while boosting resistivity. In contrast, the polaron potential well of NbGa is merely one-fifth that of TaGa due to the reduced hybridization between Nb-4d and O-2p orbitals, leading to a correspondingly lower resistivity in LGN crystals. Leveraging this mechanism, LGT crystal features a remarkable three-orders-of-magnitude enhancement in resistivity by co-regulation of antisite defect density and occupation sites via combining Al doping and oxygen atmospheric control. This study provides a new insight into the conduction mechanism and a general Ta-based design strategy for resistivity modulation in piezoelectric crystals.

D21-34

Electro-chemo-mechanics for interface evolution of lithium metal anode

Shizhao Xiong*
Kunming University of Science and Technology

There is an increasing demand for batteries with high safety, higher energy density as well as high power density for practical applications and thus solid-state lithium metal battery (SSLMB) has been considered as a promising candidate to meet these demands. However, the advance of SSLMB-technology is still hindered by internal failure that is caused by the growth of Li filaments and its penetration of solid electrolyte to connect cathode and anode inside battery. To understand this internal failure process which involves both electrochemical process and mechanical process, an electro-chemo-mechanical model is built to investigate the growth and penetration of lithium (Li) metal inside/through solid electrolyte [1-3]. We show that the stress concentration and preferred deposition of Li metal anode are highly dependent on the ionic conductivity and mechanical strength of the interface between Li anode and electrolyte [1]. Furthermore, relative damage induced by locally high stress is found to preferentially occur in the region of the electrolyte/Li interface having great fluctuations. A high number density of Li filaments or voids in solid state electrolyte triggers integration of damage and crack networks by enhanced propagation [2-3]. To regulate the interface between Li metal anode and solid-state electrolyte, we showed a tailored multifunctional interlayer between the NASICON solid electrolyte ($\text{Li}_{1.5}\text{Al}_{0.5}\text{Ge}_{1.5}(\text{PO}_4)_3$, LAGP) and Li anode consisting of LAGP nanoparticles and an ionic liquid electrolyte (IL) [4].

Keywords: Solid-state batteries; Interface; Lithium metal anode; Electro-chemo-mechanics.

References

1. Xu, X., Liu, Y., Kapitanova, O. O., et al. Adv. Mater. 2022, 34, 2207232.

2. Liu, Y., Xu, X., Jiao, X, et al. Adv. Mater. 2023, 35, 2301152.

3. Sadd, M., Xiong, S., Bowen, J. R., et al. Nat. Commun. 2023, 14 (1), 854.

4. Xiong, S., Liu, Y., Jankowski, P., et al. Adv. Funct. Mater. 2020, 30, 2001444.

D21-35

4H-SiC 中杂质与缺陷的数值模拟研究

韩学峰^{*1,2}、卢圣瓯^{1,2}、宣玲玲^{1,2}、王安琦^{1,2}、陈鹏阳^{1,2}、王帆^{1,2}、杨德仁^{1,2}、皮孝东^{1,2}

1. 浙江大学硅及先进半导体材料全国重点实验室
2. 浙江大学杭州国际科创中心

4H-SiC 作为一种性能卓越的宽禁带半导体材料，凭借其高击穿场强、优异导热性和高载流子迁移率等特性，在高温、高频及大功率电子器件领域展现出巨大应用潜力。其中，掺杂浓度与缺陷密度是评估碳化硅衬底性能及工业生产成品率的关键参数。针对物理气相传输（PVT）法这一高温低压“黑箱”生长工艺难以实施在线监测的问题，本研究通过模拟与实验相结合的方法，系统分析了位错与杂质的分布规律，以及杂质对位错行为的影响机制。

研究通过对 PVT 法生长的 4H-SiC 晶体中基面位错（BPD）进行三维建模，发现工业领域广泛采用的 4 度偏轴籽晶是导致四重对称 BPD 分布的主要原因，且计算所得 BPD 密度与实验测量结果高度吻合。通过二维全局计算模型，深入研究了生长界面温度、C/Si 比和氮掺杂量随晶体长度的演化规律，综合考虑坩埚内气体交换过程与腐蚀反应的影响，阐明了其对晶体生长速率、温度场分布、C/Si 比及 N₂浓度分布的调控机制，计算结果与实验观测呈现出一致性，并据此提出了 PVT 法生长过程中的氮掺杂效率估算值。

基于热应力分布特征，本研究进一步建立了位错密度计算模型，通过引入氮元素的有效应力概念，定量分析了氮掺杂引起的应力降低效应。实验对比结果表明，5 MPa 的有效应力值可适用于特定掺杂浓度下 4H-SiC 位错密度的精准计算。该研究成果为 PVT 法生长 n 型 4H-SiC 过程中杂质与缺陷的调控提供了理论基础与技术支撑。本报告将全面展示杂质与位错的系统性研究成果，并探讨机器学习方法在该领域的创新性应用。

D21-36

机器学习助力大尺寸铌酸锂晶体生长及缺陷模型研究

陈昆峰^{*1}、薛冬峰²、包芸嘉¹、王志强¹、陈宇能¹、郭瑞强³

1. 山东大学新一代半导体材料研究院、晶体材料全国重点实验室
2. 电子科技大学（深圳）高等研究院
3. 山东高等技术研究院

铌酸锂晶体具有铁电、压电、二阶非线性、热释电等功能，被应用在滤波器、电光调制器、激光、换能器、全息存储等领域。商用铌酸锂晶体材料采用熔体提拉法生长，适宜的温场设计是提拉法工艺的核心，决定了晶体的品质以及工艺能耗。采用机器学习+有限元仿真手段可以加速大尺寸温场的开发，在工程应用中具有极大的价值。铌酸锂晶体的缺陷包含锂空位、铌反位、极化子、畴壁等，其对压电、铁电、电光等性能存在不同影响关系。由于铌酸锂缺陷结构的复杂性，采用 DFT 等单一手段往往只能分析有限类型和数量的缺陷，我们采用机器学习+DFT+MD 的方式研究了铌酸锂多种缺陷组合，分析了缺陷-热导率的对应关系。

D21-37

溶液加工有机发光二极管

谢国华*

厦门大学

溶液加工是大面积、低成本有机电致发光二极管（OLED）规模化制造的产业趋势之一。从材料、器件、工艺三个维度的交叉和融合，我们开发了面向全溶液加工的多种材料、原型器件和工艺。为了满足高性能和可溶液加工的双重需求，我们开发了一系列溶解性好、具有高荧光量子效率的热激活延迟荧光材料，利用反向系间窜越和敏化策略，结合器件工程实现了高性能的旋涂型 OLED 以及单溶质全彩喷墨打印 OLED。正交溶剂工策略是溶液加工 OLED 常用的方案，易实现多层功能层连续制备，但能够兼容载流子注入和传输、能量传递要求的材料体系非常有限，从薄膜工艺角度出发，我们研发出基于界面能操控的有机薄膜纳米转移印刷技术，突破了常规多层湿法工艺对正交溶剂的依赖，为发展全溶液加工 OLED 提供了新的思路。此外，我们尝试结合激光直接图案化和转移印刷技术，开发无掩膜技术的高分辨率 Micro OLED。

D21-38

界面调控驱动有机半导体单晶的可控印刷制备及光电器件应用

乔雅丽*

Institute of Chemistry, CAS, China

有机半导体单晶因其长程有序分子排列和低缺陷态密度，展现出优异的载流子迁移率和激子扩散长度，已成为高性能光电器件的核心材料。当前，溶液法制备有机单晶薄膜主要依赖弯液面诱导技术（如提拉、刮涂、溶液剪切等），但这些接触式外力驱动方法存在显著局限性：溶液中流体传质不稳定、分子趋向于三维无序堆积，导致厚度与取向控制困难，难以满足器件对晶体形貌的精准可控制备需求。突破这一技术瓶颈的关键在于发展非接触式界面调控新方法，实现分子自组装过程的精确控制。

本团队创新性地提出多尺度界面调控策略，系统解决了有机单晶可控制备难题：

（1）气-液界面分子输运调控：创制气氛诱导涂覆技术，通过溶剂分子吸附梯度诱导定向马拉格尼流，实现单分子层精度的超薄单晶生长。该薄膜在日盲紫外波段展现出显著层数依赖的光电响应，据此构建的偏振成像传感器具有优异的二向色比性能。

（2）纳米限域结晶调控：提出双溶剂动态自限制策略，通过高表面张力反溶剂与主溶剂的协同作用，形成持久性纳米级湿膜，成功制备出大面积二维单晶。基于此的 BTBT 衍生物晶体管呈现优异的电荷传输特性，偏振紫外探测器表现出高探测灵敏度。

（3）固-液界面成核位点调控：开发微区浸润性图案化直写技术，通过设计亲疏水交替微阵列，精确控制三相线钉扎效应，实现取向高度一致的单晶阵列。该方法显著提升了晶体质量，使阵列器件性能均匀性大幅提高。

参考文献：

[1] Yanlin Song, Yali Qiao* et al. Dual-solvent-induced persistent nanoscale wet film for controllable two-dimensional molecular crystallization toward polarization-sensitive photodetectors. Science Bulletin, 2025, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scib.2025.05.007>.

[2] Yali Qiao*, Yanlin Song* et al. A general vapor-induced coating approach for layer-controlled organic single crystals. Advanced Functional Materials, 2023, 33, 2212158.

[3] Huanli Dong*, Yali Qiao*, Yanlin Song, Wenping Hu et al. Controllable-doping ambipolar conjugated polymeric semiconductors towards simplified-constructed organic logic circuits with excellent comprehensive performances. Science China Materials, 2023, 66, 2436-2444

[4] Yali Qiao*, Yanlin Song* et al. Vapor-induced coating method for well-aligned and uniform organic semiconductor single crystals. Chinese Journal of Polymer Science, 2023, 41, 1638-1645.

[5] Yali Qiao*, Yanlin Song*. Vapor-Induced Liquid Collection and Microfluidics on Superlyophilic Substrates. ACS Applied Materials & Interfaces, 2021, 13, 3454-3462.

D21-39

有机光电材料及应用

刘焘*、黄词苑、杨林基
广西大学

有机太阳能电池不仅作为新一代光伏技术,利用其活性层还可制备低成本绿色光催化/吸附剂应用于水处理领域。近年来,本人围绕“如何从分子和器件工程方面有效解决构筑有机太阳能电池理想活性层形貌,提高器件效率和稳定性的难题,并拓展有机太阳能电池活性层应用于水污染控制”等开展研究。[1-7]报道了在湿度空气环境/手套箱中分别获得 16.33 %和 17.36 %的器件效率,为当时在空气和非卤素溶剂环境中制备器件的最佳记录之一。报道了首个基于同分异构开发的聚合物受体构筑的全聚合物器件获得超过 15 %的效率和优异稳定性的结果。率先将高质量互穿网络纤维状结构有机太阳能电池活性层与广西生物质资源相结合,制备低成本可循环光催化剂/吸附剂,实现快速高效降解造纸废水中高浓度木质素类污染物,100 次重复实验效率保持高效、稳定,同时实现废水中多种重金属离子快速高效去除,10 次重复实验去除效率不减。

D21-40

钠基固体电解质多尺度设计与电池性能调控研究

侯敏杰、梁风*
昆明理工大学

近年来,钠基电池凭借成本低廉、钠资源丰富以及优异的低温性能等优势,在低速电动车、低空飞行器和大规模储能等领域展现出广阔的应用前景,有望成为锂离子电池的重要补充,并进一步推动可再生能源的普及与应用。然而,钠基电池仍面临能量密度低、循环寿命短和倍率性能差等关键挑战,亟需开发新型电池材料体系和电池性能调控技术,以突破电化学性能瓶颈。

电解质作为电池的核心组件,其性能直接决定电池的能量密度、功率密度及循环寿命等关键电化学特性。高性能固体电解质不仅能够提升电池整体性能,还能确保电池在多种工况下稳定运行。此外,通过优化固体电解质设计来调控电极/电解质界面特性,进而提高钠基电池的电化学性能,已成为当前研究的热点。基于此,通过构建材料多级结构特性与载流子传输动力学特性之间的相依关系,多尺度设计了一种具有离子-电子混合导的层状复合固体电解质用于构建电池界面处的内建电场,最终实现了负极/固体电解质界面的均匀电场和离子浓度场分布,并提高了界面的钠离子传导动力学,有效改善了负极表面钠均匀沉积和电池的倍率性能。固态 $\text{Na} \parallel \text{Na}$ 电池在 0.1 mA cm^{-2} 电流密度下可稳定循环 26400 次;固态 $\text{Na} \parallel \text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ 电池在 2C 倍率下循环 1500 次后的容量保持率高达 97.4%,即使在 -20°C 下也能保持稳定的充放电循环,电化学性能在同类电池中处于先进水平。本研究多尺度设计离子-电子混合导电复合固体电解质用于构建电池界面内建电场的策略适用于固态电池界面扩展改性,为钠基固体电解质的设计与电池性能调控提供了新的思路。

D21-41

片状有机异质结构晶态材料的宏量制备及其二维光波导研究

吕强、王雪东*、廖良生

苏州大学

具有精确定义的多组分体系、多尺度结构和异质界面的有机异质结构晶态材料由于其在催化、等离子体、光电等领域的潜在应用而吸引了广泛的关注。然而，由于不同有机组分的晶格失配问题难以解决，大规模构建有机异质结构仍然是一个巨大的挑战，也限制了它们在未来的实际应用。因此，开发一条普适性的合成路线，既能够实现大规模制造，又能够实现多功能有机异质结构具有重要意义。在此，我们提出了一种将溶液相生长方法与物理气相沉积生长方法相结合的两步策略，设计并大规模合成了一种二维（2D）有机横向异质结构（如图 1 所示）。通过上述设计策略，一方面，多组分晶体在二元溶剂协同作用下可以顺序成核并外延生长；另一方面，所制备异质晶体作为气相法的前体，进一步形成结构互换的横向异质结构。基于上述策略，我们在外延生长过程中，又选择性引入了客体分子来掺杂主体材料从而改变晶体外延层的光学性能，宏量制备了蓝-绿双环发光、蓝-绿-蓝三环发光的横向有机异质晶体。进一步，我们提出了掺杂与光氧化协同策略，实现了红-绿-蓝三环发光集成的二维有机横向异质晶体。所制备的系列 2D 有机横向异质结构显示出良好的光传输能力和可调谐的空间激子转换，表明其在纳米光子学领域中的应用潜力。

参考文献

- [1] Lv, Q.; Wang, X. D.*; Yu, Y.; Xu, C. F.; Yu, Y. J.; Xia, X. Y.; Zheng, M.*; Liao, L. S.* Nat. Chem. 2024, 16: 201.
- [2] Lv, Q.; Wang, X. D.*; Yu, Y.; Zhuo, M. P.; Zheng, M.*; Liao, L. S.* Nat. Commun. 2022, 13: 3099.
- [3] Lv, Q.; Wang, X. D.*; Yang, W. Y.; Wang, K. L.; Xu, C. F.; Zheng, M.*; Liao, L. S.* CCS Chem. 2023, 5: 423.
- [4] Lv, Z.-J.; Lv, Q.*; Feng, T.-Z.; Jiang, J.-H.; Wang, X.-D.* J. Am. Chem. Soc. 2024, 146: 25755–25763.
- [5] Feng, T.-Z.; Lv, Q.*; Lv, Z.-J.; Xu, C.-F.; Jiang, J.-H.; Wang, X.-D.* Sci. Adv. 2025, 11, eadt0938.

D21-42

尖晶石结构近红外长余辉材料的缺陷及多场景应用

夏侯俊卿*

济南大学

ZnGa₂O₄:Cr³⁺基近红外长余辉材料因其可在体外激发体内免激发、具有适于“近红外生物窗口”的发射波长和余辉寿命长等优点，在生物成像领域受到广泛关注。但由于 ZnGa₂O₄:Cr³⁺中阳离子的具体占位及 Cr³⁺离子周边的缺陷种类、数量和分布不可控，长余辉机理尚未明确，也限制了应用领域的拓展。因此，开发新型近红外长余辉材料并明确掺杂所引发的非本征缺陷和荧光性能的构效关系具有重要的理论意义和实用价值。本工作通过缺陷构筑策略系统探索微观结构-性能关联机制，开发新型近红外长余辉材料及其多场景应用。采用溶胶凝胶、水热及高温固相等方法，结合化学单元取代与复合掺杂技术，系统分析微观缺陷对发光性能的影响，明确长余辉发光机理等重要基础科学问题，实现材料缺陷态与发光性能的精准调控。本工作为长余辉材料的缺陷调控机理提供新见解，并拓展其在光学温度传感、动态防伪、生物医学成像及智能检测等领域的应用前景。

D21-43

铈基氧化物储放氧性能新认识

张泽树*

中国科学院赣江创新研究院

在固体氧化物中，氧原子的迁移对材料特性产生深远影响，但量化动态迁移的严谨概念框架一直缺失。为弥补这一空白，我们开发了一种动态氧迁移释放模型，采用微分单元法并提供了全面的数学证明。这个新模型阐明了金属氧化物的氧释放速率随释放氧量呈指数衰减的关系。我们进一步优化了模型，以区分内部（体相）氧的迁移和表面氧的反应，并通过实验验证了每种迁移过程的能垒。以二氧化铈（CeO₂）为案例研究，我们的模型预测并证实了在不同温度和形貌下氧释放的能垒，与密度泛函理论（DFT）分析一致。此外，该模型的多功能性通过其在多种金属氧化物中的应用得到了证明，包括铈锆固溶体、氧化锰和氧化铁，显示出广泛的普遍应用潜力。揭示的氧迁移和释放动力学为优化功能性金属氧化物的设计提供了理论基础，并为更精确评估其氧反应性奠定了基础。

D21-44

多尺度晶格工程驱动高性能水分解电催化剂的构筑与机制研究

张睿谦¹、徐珂²、钱彬彬²、陈昆峰³、薛冬峰^{*2}

1. 中国科学院深圳先进技术研究院
2. 电子科技大学（深圳）高等研究院
3. 山东大学

高效、稳定的电催化剂对实现可持续水分解制氢至关重要。近年来，界面工程、缺陷工程等晶格工程手段在调节催化剂电子结构与动态反应行为方面展现出重要价值。本工作通过多尺度晶格结构设计显著提升析氧反应（OER）与析氢反应（HER）性能。其一，利用普鲁士蓝类（PBA）引导 NiFe 层状双氢氧化物（LDH）表面电化学重构，形成高价态氢氧化物，并调控表面自旋态与轨道构型，显著增强 OER 活性与稳定性。其二，通过 Mo 掺杂调控形貌、Fe 电沉积诱导相变，构建 Mo 掺杂 Ni₃S₂/NiS 异质结构，有效优化电子结构与中间体吸附行为，实现 OER/HER 的双功能催化，在工业电流密度下展现优异性能。其三，基于缺陷工程，在具有阳/阴离子空位的 MoS₂ 表面诱导 NiCo LDH 生长，不同缺陷类型可精准调节电子态与吸附能，提升催化活性与反应稳定性。本工作的研究揭示了晶格界面结构演化与电子调控在催化性能优化中的核心作用。

D21-45

碳纳米管基 Ir 簇 / Fe₂O₃ 异质结构的界面调控及其在柔性锌空气电池中高效析氧反应的应用孙向飞¹、张丹彤²、徐珂³、钱彬彬³、陈昆峰^{*1}、薛冬峰³

1. 山东大学
2. 齐齐哈尔大学
3. 电子科技大学

开发用于析氧和氧还原反应的双功能和通用 pH 电催化剂在金属-空气电池领域具有重要意义。在本研究中，我们通过设计 Ir 簇/Fe₂O₃@CNTs 异质结构，成功地提高了在酸性和碱性条件下的 OER 和 ORR 活性。所得材料在 0.5 M H₂SO₄ 和 1.0 M KOH 介质中，电流密度为 10 mA cm⁻²，过电位分别为 300 mV 和 298 mV。理论计算表明，Ir 团簇靠近费米能级增强了表面电子发射能力，促使电子从 Ir 层向 Fe₂O₃ 层转移。这一过程有效地增加了表面电子密度，从而提高了电子发射的可能性。制备的可充电柔性锌空气电池在电流密度为 2 mA cm⁻² 的情况下，在 330 h 内表现出优异的循环稳定性，容量保持率为 58.2%，突出了其作为最先进的双功能氧电催化剂的作用。

X. Sun, D. Zhang, K. Xu, B. Qian, K. Chen, D. Xue, Ir cluster/ Fe_2O_3 heterostructures on carbon nanotubes boosting oxygen evolution/reduction reactions for flexible Zn-air battery, *Nano Materials Science* (2025). DOI: 10.1016/j.nanoms.2025.02.002

D21-46

氢冶金：等离子体制备细小晶粒高纯钛

陈思锦*、崔翔文

昆明理工大学

钛作为一种重要的难熔稀有轻金属，具有密度低、比强度高等优点，高纯钛在工业领域及医疗卫生领域发挥着巨大的作用（如航空航天、电子器件等）。本作品通过直流电弧氢等离子体精炼海绵钛制备出细小晶粒 4N 级高纯钛锭，在精炼过程中分别探究了精炼时间、电流大小、气压大小和反应气氛对钛纯度的影响，随后探究了氢气加入量对晶粒尺寸的影响。提出了氢等离子体精炼海绵钛的热力学驱动与动力学强化的双机制，活性 H 粒子会与金属生成金属氢化物，提高杂质元素的去除率，并通过吉布斯自由能计算及原位 OES 动态监测加以证明，计算了钛与主要杂质金属的饱和蒸汽压，分离系数等热力学及动力学趋势，阐明了氢等离子体精炼海绵钛过程中杂质选择性去除的化学与物理机制。且通过调控氢气的加入量调控晶粒的尺寸并通过 EBSD 表征。综上所述，氢等离子体精炼海绵钛提供了一种细小晶粒高纯钛的制备方法，简化了高纯钛的制备工艺同时提供了一种晶粒尺寸调控的新方法。

D21-47

Gd³⁺/Tb³⁺双掺硼硅酸镧闪烁玻璃中 Gd³⁺的双重角色：能量传递与团簇分散协同增强绿色发光

黄发铮、李凌云*

福州大学

本研究系统探究了 Gd³⁺与 Tb³⁺双掺硼硅酸镧玻璃的发光调控机制，揭示了 Gd³⁺在能量传递与离子分散效应中的协同作用。通过单掺 Tb³⁺浓度优化实验，发现 Tb³⁺掺杂量为 37%时，光致发光（PL）与辐射发光（RL）性能达到最优值。在此基础上，进一步引入 Gd³⁺进行浓度梯度优化，结果表明，当 Gd³⁺掺杂量为 20%、Tb³⁺为 37%时（LBSO:20%Gd,37%Tb），其 PL 强度与 RL 强度均强于单掺 37%Tb³⁺，RL 积分强度达到 BGO 晶体的 28%，是一种潜在的闪烁玻璃。

关键发现与机理分析：

Gd³⁺→Tb³⁺能量传递的直接证据：在固定 Gd³⁺浓度为 10%的体系中，随着 Tb³⁺浓度增加（1~27%），Gd³⁺的 312 nm 荧光强度衰减达 98%，而 Tb³⁺的 542 nm 绿光发射（对应 5D₄→7F₅ 跃迁）强度增强至初始值的数 5 倍。同时，Gd³⁺的荧光寿命从 0.748ns 降至 0.67ns，表明能量通过 Gd³⁺的 6P_{7/2} 能级向 Tb³⁺的 5H₇ 能级进行无辐射共振转移。

Gd³⁺的团簇分散效应验证：对比实验显示，当以 10%Y³⁺或 10%Lu³⁺替代 10%Gd³⁺时，共掺 20%Tb³⁺的绿光强度仅为 Gd³⁺体系的 65%和 61%。由于 Y³⁺/Lu³⁺与 Tb³⁺间无能量传递通道，其增强效果仅源于离子分散作用。而 Gd³⁺体系通过双机制协同（能量传递+分散效应）使发光强度进一步提升至单掺体系的 2.6 倍。

本研究为高浓度稀土掺杂玻璃的设计提供了新思路：通过 Gd³⁺的双功能调控，可同时实现发光中心的高效激发与浓度猝灭抑制。

D21-48

Sb³⁺掺杂有机-无机杂化金属卤化物晶体的抗热猝灭特性研究

刘清逸、李凌云*

福州大学材料科学与工程学院

零维有机-无机杂化金属卤化物(0D OIMHs)凭借其独特的晶体结构及可调控电子结构,在光致发光、光电探测等领域展现出显著优势。然而这类材料普遍存在显著的发光热猝灭效应——随着温度升高发光强度迅速衰减,严重制约了 0D OIMHs 的实际工作温度范围。因此,发展兼具高发光效率与优秀热稳定性的 0D OIMHs 仍面临严峻挑战。当前针对热稳定发光材料的系统性研究尚处于起步阶段,并且以全无机晶体为主,如 Cs₃GdCl₆:Sb (I₄₂₀:I₃₀₀=82.4%), BaGa₂O₄:Bi (I₄₇₃:I₃₀₀=88.1%), Cs₂BaP₂O₇:0.01Eu²⁺ (I₄₂₃:I₃₀₀=92.5%)等,以及部分 0D OIMHs,如(BTPP)₂MnCl₄:Sb (I₄₂₀:I₃₀₀=72.4%)等。

纯相(C₁₅H₁₈N)₂InCl₅ 在 325nm 激发下仅有微弱的蓝光发射,PLQY 不到 1%。本研究通过 Sb³⁺掺杂策略成功实现了(C₁₅H₁₈N)₂InCl₅ 体系的高效光致发光性能。优化后的(C₁₅H₁₈N)₂In_{1-x}Sb_xCl₅ 晶体在 365 nm 激发下展现出橙红色宽带发射特征,发射峰位于 650 nm 处,其 PLQY 接近 100%。尤为突出的是,该材料展现出宽温域的抗热猝灭特性:在低温区间,从 80K 至 300K,发光强度保持率超过 85%;在高温区间,400 K 时仍能维持 70%以上的室温发光强度。通过实验与 DFT 计算的协同系统研究,我们证明了该晶体的抗热猝灭性能源自于(C₁₅H₁₈N)₂InCl₅ 晶体结构本征的良好稳定性,[SbCl₅]₂-多面体热诱导畸变带来的电子高度局域化,以及浅缺陷态对 Sb³⁺发射的补偿,这三方面的结合。此外,通过 Bi³⁺掺杂产生的敏化剂效应,(C₁₅H₁₈N)₂In_{1-x}Bi_xCl₅ 晶体的蓝光发射 PLQY 提升至约 6%。其荧光强度随温度升高显著降低,表现出典型的热猝灭行为。

基于温度依赖发光特性的差异,继续合成了 Bi³⁺/Sb³⁺共掺杂的(C₁₅H₁₈N)₂InCl₅ 晶体。在 365 nm 紫外激发下,该晶体呈现双峰发射特征,发射峰分别位于 475 nm 和 650 nm,与单掺杂晶体光谱高度匹配;并且双发射峰的热猝灭特性也与单掺杂体系完全吻合。基于该双掺杂晶体,我们成功制作了温度荧光探测器件,在 160K 到 300K 范围内具有优秀探测能力。

墙报**D21-P01****光致 TiH₂ 晶格氢动态交换促进 C-H 活化**

徐建恒、张泽树*、张一波

中国科学院赣江创新研究院

甲烷干重整(DRM)通过将甲烷(CH₄)和二氧化碳(CO₂)转化为合成气(H₂/CO),为温室气体利用提供了一条前景广阔的途径。然而,其工业应用仍然受到高能耗、碳沉积和催化剂快速失活的限制。在这项工作中,我们开发了一种光热 Ni/TiH₂ 催化剂,在温和的热条件下(< 450 °C)实现了高效的 DRM 转化。TiH₂ 载体的半金属特性显著提高了光热能量转换效率,同时通过活性晶格氢物种实现了动态氢交换。同位素标记实验证实,晶格氢直接介导了 CH₄ 中 C-H 键的活化。动力学研究和理论计算显示,光生电子-空穴对协同促进了 CH₄ 中的 C-H 裂解和 CO₂ 解离,同时加速了中间物质的转化。与传统热催化相比,这种协同效应使表观活化能降低了 68%,从而使二氧化碳的生产率在 200 °C 时达到 552.1 mmol gNi⁻¹ h⁻¹,超出热力学平衡速率三个数量级。我们的研究结果阐明了晶格氢在 C-H 活化中的机理作用,并强调了金属氢化物作为光热催化剂支持物在可持续的 CH₄ 和 CO₂ 转化中的潜力。

D21-P02**光子增强 Rh-Mn/CoAlO_x 异质结构催化剂中晶格氧迁移率以提高 CO-SCR 催化性能**

陈凯婷、李庆伟、韩新宇、饶成、杨向光、张一波*

开发高效的低温选择性催化还原 (CO-SCR) 催化剂是降低氮氧化物 (NO_x) 排放的关键挑战。在这里, 我们报道了一种光热增强的 Rh-Mn/CoAlO_x 异质结构催化剂, 在可见光到红外光照射下实现了出色的 NO 转化率 (140 °C 时超过 90%) 和 N₂ 选择性 (>80%)。通过将高度分散的 Rh 单元和 Mn 簇结合到水滑石衍生的 CoAlO_x 载体上, 催化剂表现出协同的光吸收和动态晶格氧迁移能力。通过原位漂移、XAFS、XPS、EPR 等技术的联合分析, 我们揭示了 Mn 的掺杂诱导了大量的氧空位, 并促进了 Rh 和 Mn 之间的电子转移, 通过类似于 Mars-van Krevelen 机制的晶格氧激活。光照降低了活化能, 根据阿伦尼乌斯分析和 NO-TPD 结果, 加速了硝酸盐中间体的分解, 提高了 N₂O 向 N₂ 的转化率。密度泛函理论 (DFT) 计算证实, 在 Rh-Mn 界面更易生成 N₂O, 表明其对 NO 的低温激活能力增强。本研究创新性地利用光增强 CO-SCR 的催化性能, 为降低 NO_x 的低能耗排放提供了一种可持续的方法。

D21-P03

表面改性 Co₃O₄ 纳米催化剂增强丙烷在低温下的光热燃烧

王雅君、张泽树*

中国科学院赣江创新研究院

丙烷 (C₃H₈) 是一种具有挑战性的挥发性有机化合物 (VOC), 由于点火温度高和催化剂失活, 在催化燃烧中面临着限制。C₃H₈ 光热催化燃烧是一种创新的催化方法, 显著提高了催化剂的低温净化效率, 但受能带结构的限制。本研究通过水热合成的方法开发了一种光热 Co₃O₄-HT 催化剂, 实现了光照下突破性的低温氧化性能 (T₅₀ <160 °C)。关键的机理揭示了 Co₃O₄-HT 的窄带隙和增强的表面光电流有利于有效的电荷分离, 而光照射通过 Mars-van Krevelen (MvK) 机制协同加速晶格氧释放, 促进气相氧活化。关键是, 光生成的活性氧增强了 C₃H₈ 的吸附, 并迅速降解羧酸盐/羰基中间体, 克服了传统的动力学限制。本研究建立了一种结合光子能量利用和热活化的双功能催化策略, 为设计高效 VOC 氧化系统提供了一个通用框架。带隙工程和反应途径优化之间的协同作用为可持续空气污染控制技术开辟了新的途径。

D21-P04

稀土离子激活 Ca₃Li_{0.275}Nb_{1.775}Ga_{2.95}O₁₂ 晶体的生长和性能研究

李谓泓、朱昭捷、黄一枝、涂朝阳、王燕*

中国科学院大学海西研究院

随着蓝光 LD 泵浦源的商用化, 直接泵浦稀土离子掺杂激光晶体实现可见光激光输出备受关注。目前对 Dy³⁺、Tb³⁺、Eu³⁺ 的可见光激光输出的报道相对较少。采用提拉法生长一系列 Dy³⁺、Tb³⁺、Eu³⁺ 掺杂的 CLNGG 晶体, 对生长的晶体进行性能表征。通过对生长的晶体进行系列室温吸收谱、荧光发射谱测。Tb³⁺:CLNGG 晶体在 487 nm 处具有较高的吸收截面, 10 at% Tb³⁺:CLNGG 在 543nm 绿光波段的受激发射截面达 2.55×10⁻²¹ cm², 展现出优异的绿光激光潜力。5 at% Eu³⁺:CLNGG 在 610nm 橙红光波段的发射截面达 7.912×10⁻²¹ cm²。通过 Tb³⁺ 的敏化作用使 Eu³⁺ 的橙红光跃迁强度提升 1.2 倍, 能量传递效率达 32%。Dy³⁺:CLNGG 在 447nm 处吸收截面为 0.846×10⁻²¹cm², 黄光发射截面达 3.89×10⁻²¹cm²。Tb³⁺ 共掺杂使黄光发射截面提升至 4.12×10⁻²¹ cm²。Eu³⁺ 共掺杂使黄光发射截面进一步增至 4.80×10⁻²¹ cm², Dy³⁺/Tb³⁺ 和 Dy³⁺/Eu³⁺ 共掺杂晶体能展现出优异的黄光性能。

D21-P05

多级孔铈锆固溶体纳米晶的合成及高热稳定催化性能研究

刘凯杰、刘钊、杨向光、张一波*

中国科学院赣江创新研究院

纳米级铈锆固溶体晶体作为重要的稀土储氧材料，在汽车尾气净化等众多催化领域中扮演着至关重要的角色。然而，传统方法制备的纳米铈锆基材料在高温下易发生严重的烧结和晶粒长大，导致其比表面积急剧下降和性能劣化，从而限制了其高温应用和实际服役寿命。本研究针对上述挑战，创新开发了一种无需添加表面活性剂、操作简便高效的自模板法。通过精确控制碳酸铵对铈锆氢氧化物前驱体的选择性刻蚀过程，成功实现了铈锆固溶体纳米晶的原位造孔。通过此方法制备的铈锆固溶体，其结构由具有立方萤石结构的紧密连接的纳米晶构成，内部形成了包含纳米晶粒和丰富互连孔道的多尺度晶体结构。这种独特设计的多孔结构赋予了材料优异的高热稳定性。测试结果表明，所得多孔铈锆固溶体纳米晶在 1000 °C 高温老化 5 小时后仍能保持高于 30 m²/g 的高比表面积，显著优于传统方法制备的同组成样品，并有效抑制了高温下纳米晶的过度长大和材料的相分离现象。

作为一种高性能的结晶功能材料粉体，该多孔高热稳定铈锆固溶体纳米晶是理想的高效催化剂载体。将其负载铂 (Pt) 后，在低温一氧化碳 (CO) 氧化反应中表现出卓越的催化活性，尤其在存在水蒸气的湿润条件下，活性更是显著提升。这主要得益于水蒸气在材料表面吸附并解离形成高活性的羟基物种，这些羟基物种能够与吸附的 CO 分子协同作用或促进氧化进程，同时材料的高孔隙结构也有效促进了反应物的吸附、扩散及转化，从而充分体现了该材料在模拟真实催化环境下的优异稳定性和性能优势。该自模板制备策略为设计和合成具有可控纳米晶结构、丰富孔道及优异热稳定性的粉体催化材料提供了新的途径，具有重要的实际应用指导意义。

D21-P06

有机光电材料及其交叉催化应用

杨林基、刘焘*

广西大学

在有机半导体材料领域，利用三元策略构建高效器件的研究成果不胜枚举，但我们另辟蹊径，首次将其作为光催化剂应用于环境废水处理领域。我们成功制备了负载型有机光电材料 PM6:PYIT:PM6-b-PYIT，并以活性改性椰壳炭为基底支撑，制备了一种新型高效、稳定、环保、可回收的有机光催化剂 (CSC-N-P.P.P)，在同时去除 Sb(III) 和 Sb(V) 方面表现出了惊人的效果。在 15 分钟内，CSC-N-P.P.P 对锑(III)和锑(V)的去除率达到惊人的 99.9%，同时，在 ppb 级和弱光 (约 1 W/m²) 条件下，5 分钟内即可处理达到欧盟和美国国家环境保护局规定的饮用水标准，即使经过 25 次循环，效率仍保持在 80% 左右。此外，对于 As(III)、Cd(II)、Cr(VI) 和 Pb(II)，CSC-N-P.P.P 也能实现在半小时内去除。与传统光催化剂 TiO₂ 相比，该研究制备的光催化剂不仅具有成本低、可回收、可循环、能带结构调整灵活等特点，而且提高了光子利用率和去除效率，成功解决了传统光催化剂重复利用率低、结构调整困难、能耗高等问题，具有很强的适用性和现实意义。这项工作为有机光电材料开辟了新的应用方向，为环境修复技术的进步拓宽了道路，是有机光电材料和废水处理领域发展的里程碑，为去除环境中剧毒重金属锑污染提供了亟需的解决策略。

D21-P07

Pr: CeF₃ 激光晶体的生长与性能研究

郑龙兴、王燕*、朱昭捷、涂朝阳、黄一枝

中国科学院福建物质结构研究所

Pr³⁺的 ¹D₂→³H₄ 的跃迁对应于约为 594 nm 的在皮肤治疗方面具有广泛应用的黄橙光，而在近红外区域则是有着更加丰富的半峰宽很宽的辐射跃迁。为了使 443 nm 泵浦的能量有效的传递至 ¹D₂ 能级，考虑 Ce³⁺ 和 Pr³⁺ 之间的能量转移，结合氟化物晶体声子能量较低，易于加工，反射指数较低，从紫外到中红外光谱跨度的透光率较高等的特点，选择了 CeF₃ 作为 Pr³⁺ 的宿主。用坍塌下降法成功生长了 0.2~0.8 at.% Pr: CeF₃ 晶体，分析了它的蓝光偏振吸收性能，发现 Pr: CeF₃ 晶体在 442 nm 具有较强的宽的偏振吸收带，可以很好的与市售的蓝光 InGaN LD 匹配。以 442 nm 激发，记录了可见光区域的偏振荧光光谱和近红外区域的非偏

振发射光谱,发现 Pr: CeF₃ 晶体在可见光区域的只有 600 nm 橙光发射峰,在近红外区域有多个强的发射峰。通过比较与激光作用相关的光谱参数,发现 Pr³⁺的最佳掺杂浓度为 0.2 at.%,即 0.2 at.% Pr: CeF₃ 晶体可作为橙光和近红外激光的良好增益介质。此外,0.2 at.% Pr: CeF₃ 晶体在~600 nm 处的半峰宽和荧光寿命远大于其他已报道的 Pr³⁺激光晶体,表明其有潜力作为调 Q 激光器和锁模脉冲激光器的增益介质。

D21-P08

CaGdAlO₄ 单晶的色心机理研究与调控

林晓威、李凌云*

福州大学材料科学与工程学院

CaGdAlO₄ (CGA) 晶体因其优异的热性能和光学性能一直以来都是激光晶体领域的研究重点。特别是,其晶体结构中 Ca²⁺ 和 Gd³⁺ 共同占据同一晶格位点,呈现随机分布。这种结构上的无序性导致吸收和发射光谱出现非均匀展宽,从而能够实现对泵浦光的高效吸收以及通过锁模技术产生超快激光。然而,CGA 晶体的色心缺陷限制了其在光学领域的实际应用。虽然纯的 CGA 晶体具有宽带隙 (4.4 eV) 且本应呈现无色透明,但色心缺陷的存在会引入不必要的光吸收使其外观呈现黄色。在富氧气氛中退火会加剧这些缺陷,加深晶体颜色;而在还原气氛中退火则能抑制缺陷,使晶体颜色变浅。目前的研究将 CGA 色心归因于与氧相关的缺陷。然而,具体的氧缺陷类型及其与色心之间的关联机制尚不明确,需要进一步的机理研究。

在本研究中,我们在不同气氛下采用提拉法生长了含有不同程度色心缺陷的 CGA 单晶,通过结合结构分析 (XRD)、元素分析 (XPS)、光谱学表征和计算模拟的方法,系统阐明了 CGA 晶体中色心的形成机制。我们的结果确定了间隙氧是 CGA 晶体着色的主要来源。我们的研究表明,色心缺陷在多晶原料的烧结过程中就已经形成,因此,在合成多晶原料过程中抑制间隙氧缺陷对于彻底消除 CGA 晶体色心至关重要。基于这些认识,我们开发了一种经济有效的策略来合成无色心的 CGA 多晶原料。所获得的多晶原料呈纯白色,且可见光吸收可忽略不计。使用这些多晶原料生长的单晶无色、透明且质量高。这项工作不仅阐明了 AReAlO₄ (A = Ca, Sr; Re = 镧系稀土元素) 晶体中的色心缺陷形成机制,也为提升此类单晶材料的质量提供了一条切实可行的途径。

D21-P09

氧化锌晶体中点缺陷对声子热输运的影响机制研究

包芸嘉^{1,2}、陈昆峰¹、郭瑞强^{*2}

1. 山东大学

2. 山东高等技术研究院

氧化锌 (ZnO) 晶体作为兼具介电电压电特性与宽禁带半导体性能的多功能材料,在射频声表面波器件、紫外光电器件及柔性透明电子系统中扮演关键角色。其本征高热导系数 (κ) 是支撑器件稳定运行的核心参数。然而,受限于生长技术的挑战,实际制备的 ZnO 晶体中往往存在大量点缺陷,或由于掺杂调控其电学特性而引入缺陷,从而显著降低其 κ ,限制了其在高性能器件中的应用潜力。在本工作中,我们基于从头算格林函数方法结合 Peierls-Boltzmann 输运方程 (PBTE),系统量化了典型点缺陷(包括空位和置换)对 ZnO 中 κ 及声子散射机制的影响,特别聚焦于声子-缺陷散射与声子-声子散射之间的竞争关系。研究结果表明,即使在极低缺陷浓度下,点缺陷亦可显著抑制 ZnO 的 κ 及其温度依赖性。该竞争关系强烈依赖于缺陷类型、浓度及温度等因素。本研究加深了对含点缺陷材料中微观热输运机制的理解,为 ZnO 及类似材料在集成器件中的热管理挑战提供了理论支持,并为利用缺陷工程实现热性能可控调制提供了有效途径。

仅发表全文

D21-PO01

仿矿物电催化材料多尺度设计制备研究

钱彬彬¹、张睿谦²、徐珂¹、郎亚宁¹、陈昆峰³、薛冬峰^{*1}

1. 电子科技大学（深圳）高等研究院
2. 中国科学院深圳先进技术研究院
3. 山东大学新一代半导体材料研究院

电催化材料在能源转换与环境治理中具有重要应用，但其性能仍受限于活性位点不足、稳定性差及传质效率低等挑战。受天然矿物独特电子结构与自优化特性的启发，本研究提出“仿矿物电催化材料多尺度设计”新策略，通过跨尺度调控活性中心与界面动态行为，显著提升材料催化性能。在原子-分子尺度，揭示了矿物缺陷（如硫空位、金属配位不饱和位点）与电子局域化的协同效应，建立“缺陷-电子态-活性”协同作用机制，指导设计高活性仿生催化中心。在介观-宏观尺度，开发了分级孔道结构调控技术，优化传质与电荷传输路径，使析氧/析氢反应效率提升 5–10 倍。进一步通过原位表征发现材料在电催化过程中的动态界面重构行为，提出“溶解-沉积-转化”机制，实现催化剂长效稳定运行。

D21-PO02

Pt 基 CO 低温氧化催化剂的活性位抗再分散性研究

陈晓辉*

赣江创新研究院

Pt/CeO₂ 作为三效催化剂的核心组分，在 CO 氧化反应中表现出优异的催化性能。然而，CeO₂ 载体上对 CO 氧化具有高活性的 Pt 团簇容易在富氧和高温条件下转化为低活性的 Pt 单原子，制约其实用性能。因此，开发兼具高活性和高温稳定性的 Pt/CeO₂ 基催化剂具有重要意义。本研究从增强 Pt 团簇抗分散性和调控 Pt 单原子结构稳定性两个维度出发，成功制备了具有优异 CO 催化性能和高温抗氧化能力的 Pt/CeO₂ 体系，并对 Pt 的抗分散机制和单原子结构演变进行了深入研究，发现载体表面的结合位点数量和 Pt-O 键键强将影响 Pt 的抗分散性能。

首先，通过调控氧化铈载体的形貌和暴露晶面，系统探讨了 Pt 颗粒在不同载体上的再分散行为及其临界条件。研究发现，Pt 颗粒再分散过程与两方面因素有关。其一，由于 Pt 单原子密度存在阈值，过高的密度会因缺乏可占据位点而促使 Pt 始终保持团簇形态，进而有利于 CO 氧化；其二，在相同 Pt 单原子密度下，立方氧化铈 cCeO₂ 的（100）面易促进 Pt 团簇分散，八面体氧化铈 oCeO₂ 的（111）面则导致 Pt 团簇烧结，而多面体氧化铈 CeO₂ 和棒状氧化铈 rCeO₂ 介于二者之间。结果表明，~2.4 nm Pt 颗粒在 CeO₂ 和 rCeO₂ 表面的再分散温度为 500 °C。此外，Pt 单原子催化剂的 T50 比 Pt 团簇催化剂高约 100 °C。

其次，采用共沉淀法制备 Pt/Ce₉₀Bi₁₀O 催化剂，通过调控载体表面的 Ce 空位浓度和 O 电子密度，并利用 Bi 元素的高电负性，成功实现了 Pt 团簇在 500 °C 富氧条件下的抗分散性能，提升了其 CO 氧化活性。研究表明，较大离子半径和较低价态的 Bi³⁺抑制了 Ce³⁺/Ce⁴⁺转化，促使材料表面氧空位的形成与 Ce 空位的填充，降低了与 Pt 配位的晶格氧比例，减少了 Pt²⁺占据 Ce 空位而形成 Pt₁O₄ 单原子结构的概率；同时，高电负性的 Bi³⁺和 Ce⁴⁺降低了相邻 O 原子的电子密度，削弱了 O 原子与 Pt²⁺的结合强度，实现了 Pt 团簇在铈基载体表面的稳定存在。

最后，通过在 CeO₂ 载体中引入 Ni 助剂，实现了接近单原子水平的 Ni 分散度，由此带来的载体表面结构和化学键的优化显著改变了 Pt 单原子的结构稳定性。研究表明，低电负性的 Ni 助剂虽然无法阻止 Pt 颗粒的再分散过程，但能有效降低 Pt 单原子的稳定性，改变 Pt-O 键键长，使其还原温度降低 20 °C，促使

Pt 单原子在反应过程中能在更低温度下转化为高活性 Pt 团簇，提升了催化剂的 CO 氧化性能。

D21-PO03

光热协同甲烷催化燃烧

赖俊安*

中国科学院赣江创新研究院

甲烷燃烧作为甲烷资源化利用的重要途径，其直接燃烧存在能量消耗过高、环境污染等问题，而催化剂能够通过降低反应的能垒使反应在温和条件下进行。在甲烷催化燃烧的过程中，甲烷第一个 C-H 键的断裂是反应的决速步，从甲烷催化燃烧主要使用的催化剂来看，过渡族金属氧化物中 Co₃O₄ 具有相对优秀的甲烷燃烧催化效率。其核心机理在于 Co-O 键的弱结合性使其能够快速断裂并产生氧空位且 Co³⁺ 作为活化位点能够有效吸附甲烷并产生甲基自由基。因此 Co₃O₄ 是甲烷催化燃烧中的重要材料。此外，Co₃O₄ 作为一种半导体材料，在吸收特定波长光子后能够跃迁至激发态并产生光生电子-空穴对，这些光生电子-空穴在有效分离后能够参与催化反应的进行，进一步降低反应的能垒。且 Co₃O₄ 表现颜色为黑色，黑色材料具有广泛的吸光范围，不仅限于紫外光，在可见光波段也具有吸收，而可见光波段的光热效应能够大幅提高体系温度，从而减少外部加热耗能，达到降低能量消耗的目的。因此，Co₃O₄ 具备光热协同催化的应用潜力。然而，Co₃O₄ 等常规半导体材料的光生载流子复合率高、光利用率低等问题仍制约了其催化性能，需通过一定的结构修饰改进。

光子晶体是一种介电常数或折射率在可见光范围内周期性排列的材料，这种结构能够产生称为光子带隙的“禁带”，能量处于禁带范围的光子不能通过介质传播，从而实现抑制、减慢、限制或引导某些晶格方向的电磁波。该现象被称为“慢光子效应”，常用于抑制半导体材料的自发发射，从而增强半导体材料的性能。反蛋白石结构通过规则排列的孔隙网格，可产生“慢光子效应”，有效延长光子在材料中的传播路径，从而提高光吸收效率。同时，该多孔结构可优化反应物传质与产物的扩散性能，因此，可将反蛋白石结构应用于光热协同催化领域以提高催化效率。本章通过模板法构筑了三维大孔反蛋白石结构的 Co₃O₄ (3DOM-Co₃O₄) 复合结构。实验结果表明，该材料在 1.75 W cm⁻² 的光照下，甲烷燃烧反应的 T₉₀ 温度较无固定形貌的 Co₃O₄ 降低了 51 °C (低至 380 °C)，且在光热协同催化一氧化碳(CO)氧化及甲苯(C₇H₈)燃烧反应中均表现出显著的性能提升。这种结构优化策略通过整合光子晶体特性和光热效应，为高效甲烷燃烧催化剂的设计提供了新思路。

D21-PO04

稀土掺杂 CeO₂ 的合成及其 CMP 性能研究

袁帅、张一波*

中国科学院赣江创新研究院

CeO₂ 作为一种常用的稀土抛光粉，抛光性能十分优异，但在其抛光研究中，平衡材料去除率 (MRR) 和表面粗糙度 (Ra) 一直是重点与难点。为探究这一问题，采用溶剂热法合形成形貌规整，粒径较为均一，分散性好的球形 CeO₂，并对其进行了 Pr、Y 等稀土元素的掺杂，研究稀土元素掺杂对氧空位形成的改变，以及引起的 Ce³⁺ 比例的变化对抛光性能的影响。根据材料表面 Ce³⁺ 的含量，与 CMP 抛光实验结合，结果显示 Ce³⁺ 含量较高的抛光磨料对硅片的抛光效果更好，其中 Pr 掺杂的 CeO₂ 磨料，MRR 高达 445.71 nm/min，抛光后硅片表面的平均粗糙度 Ra 和均方根粗糙度 Rq 分别为 1.231 nm 和 1.53 nm，Pr 元素的掺杂能够改变 Ce 基抛光粉表面的化学状态，进而影响抛光过程。通过对氧化铈形貌、粒径，以及表面 Ce 的化学状态的调控，实现了稀土掺杂 CeO₂ 抛光粉具有较快的材料去除率和确保硅片表面较好的表面粗糙度，本研究可为开发高性能氧化铈基抛光粉提供一定的理论及技术指导。关键词：CeO₂；溶剂热法；CMP；稀土元素

D21-PO05

基于无定形原子层铂团簇点火效应的丙烷低温高效催化燃烧

方杨飞、刘凯杰、张一波*、杨向光

中国科学院赣江创新研究院

开发用于低温碳氢化合物燃烧的高活性催化剂至关重要，但仍具有挑战性。载体的晶型和活性物种的分散度对丙烷燃烧催化剂有很大影响，但其内在机理仍不清楚。在本研究中，制备了不同晶相的二氧化钛上的无定形原子层铂簇（AL）和铂单原子（SA），并将其用作丙烷燃烧催化剂，其中具有原子层铂簇的 Pt/a-TiO₂ 催化剂表现出较好的催化性能。Pt/a-TiO₂-AL 在 230 °C 时可实现 90% 的丙烷转化率 (T_{90})，在 240 °C 时具有最高的反应速率 ($39.57 \times 10^{-7} \text{ mol g}^{-1} \text{ s}^{-1}$) 和 TOF 值 ($7.72 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$)。动力学研究表明，与 Pt/p-TiO₂-AL 和 Pt/r-TiO₂-AL 催化剂相比，氧气对 Pt/a-TiO₂-AL 的抑制作用较低；同时，与 Pt/a-TiO₂-SA 相比，Pt/a-TiO₂-AL 催化剂表现出较低的表观活化能。DFT 结果表明，TiO₂ 上的原子层 Pt 簇比 Pt 单原子具有更低的氧空位形成能，这是由于完全暴露的原子层 Pt 簇中相邻暴露的 Pt 原子之间的协同效应，其对氧具有更高的活化能力，从而通过点火效应（氧的快速活化和丙烷的快速燃烧）加速丙烷燃烧。研究结果为高效铂基催化剂的设计和合成提供见解，适用于挥发性有机化合物（VOCs）的催化燃烧。

D21-PO06**g-C₃N₄ 辅助调控 Pd 单原子配位环境提升甲烷催化燃烧性能**

陶松芸、饶成、张一波*、杨向光

中国科学院赣江创新研究院

天然气汽车尾气和矿井通风空气等大量低浓度甲烷排放造成严重温室效应，设计合成能够在低温下消除低浓度甲烷的催化剂仍具有很大挑战。调控催化剂活性金属的配位环境可直接有效优化催化剂的催化性能。本研究采用具有富电子结构的类石墨相氮化碳（g-C₃N₄）来调节 Pd₁/CeO₂ 催化剂（Pd₁Ce₂O₄/CeO₂）中单原子 Pd 的局部环境。与不使用氮化碳的 Pd₁Ce₃O₄/CeO₂ 相比，Pd₁Ce₂O₄/CeO₂ 催化剂的 CH₄ 燃烧活性显著增强，T₅₀ 降低了 120 °C，TOF 提高了 8 倍。氮化碳预配位 Pd 后的热分解产生还原性氨气，致使 CeO₂ 表面形成 Ce 空位和配位不饱和 Pd 单原子。这种配位不饱和单原子 Pd 催化剂有助于甲烷的活化，降低甲烷的裂解能垒，从而提升催化活性。

基于上述结果，本研究采用均苯三甲酸（H₃BTC）合成具有更大比表面积的 CeO₂-BTC 载体，利用 g-C₃N₄ 一步水热法构建双配位不饱和 Pd@CN/CeO₂-BTC 催化剂，同时调控载体 CeO₂ 与活性组分 Pd 的配位状态，进一步提升甲烷催化燃烧性能，T₉₀=367 °C。在 375 °C 经过 50 h 稳定性测试后甲烷转化率仍维持在 80% 以上。这种配位不饱和结构的构建方法为高活性催化剂的设计提供了见解。本研究基于缺陷工程对催化剂进行设计与制备，充分研究了配位不饱和现象对贵金属价态、分散度与催化性能的影响，为新型 VOCs 燃烧催化剂的设计提供了新的角度与方向。

D21-PO07**无金属 β 分子筛在 NH₃-SCR 中优异的抗硫脱硝性能研究**

边梦瑶、刘凯杰、杨向光、张一波*

中国科学院赣江创新研究院

用于 NH₃-SCR 反应的金属氧化物催化剂或金属阳离子交换的沸石催化剂会因为烟气中存在的硫氧化物发生催化剂中毒现象，由硫酸铵/硫酸氢铵沉积导致的物理中毒可以通过选择合适的反应温度范围来防止，而活性位点硫酸盐化引起的化学中毒则很难避免，并且可能导致催化剂永久失活。在这项工作中，我们提出了一种使用亚纳米反应器的无金属分子筛作为 NH₃-SCR 抗硫催化剂的策略，即，使用亚纳米反应器取代 NH₃-SCR 中的氧化还原位点。无金属分子筛不同于传统的 SCR 催化剂，它没有氧化还原位点，只有酸性位点。因此，在引入 SO₂ 时，不会出现催化剂因氧化、硫化而引起的化学中毒和失活现象。在我们的实

验中，我们发现与其他不同孔结构的沸石相比，只有具有亚纳米反应器（长、宽、高均为 6 Å）的 β 分子筛具有优异的脱硝性能。这种具有适当孔结构的无金属 β 分子筛在 300 °C 下表现出优异的脱硝活性、N₂ 选择性、稳定性和抗硫性。NO 氧化和 SCR 性能实验结果表明，无金属 β 分子筛催化剂中存在 NO 氧化和快速 SCR 反应的接力催化过程；原位 DRIFTS 实验结果表明，只有在 β 分子筛中 NO 和 O₂ 才会与预吸附的 NH₃ 发生反应；最后，DFT 计算证实， β 分子筛的孔隙结构在相同条件下促进 NO 氧化为 NO₂，使其具有高 NO 氧化能力和优异的脱硝性能。此外，即使在含有 300 ppm SO₂ 的条件下， β 分子筛也表现出优异的抗硫性，这归因于没有金属氧化还原位点的 β 分子筛不会因硫酸盐化而不可逆地失活。本研究独特的设计策略为 NH₃-SCR 工艺中无金属沸石的耐硫性提供了有价值的思路，并为设计完全耐硫催化剂提供了新的思路。

D21-PO08

富含硫缺陷的硫化镉量子点光重整塑料生成高值化学品耦合水裂解产氢

宋佳欣*

中国科学院赣江创新研究院

塑料污染已成为全球性环境问题。传统处理方法（如填埋和焚烧）易造成二次污染，而机械回收、热处理等技术则存在高能耗和成本高等问题。光催化重整技术利用太阳能将塑料在温和条件下转化为高附加值化学品和氢气，为塑料污染治理提供绿色方案，这个技术的核心在于开发高效稳定的催化剂。在现有光催化剂中，CdS 因其可见光响应特性和适宜能带结构备受关注。研究表明，CdS 基材料可通过光催化重整聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）和聚乳酸（PLA）实现产氢，例如 Uekert 团队利用 CdS/CdO_x 在碱性条件下实现了无贵金属的可见光驱动产氢。然而，CdS 催化效率受限于界面接触效率低、塑料分子活化能力不足及光生载流子复合率高的问题。因此，通过合理的材料设计以优化界面相互作用、抑制载流子复合，已成为提升 CdS 光催化性能的关键策略。

量子点（QDs）技术为解决上述问题提供了新思路。其小尺寸效应可明显增加催化剂与塑料分子的接触面积，通过减小载流子的传输距离并抑制其复合几率，实现载流子迁移效率的优化。例如，Ge 等人将 CdS QDs 负载于 g-C₃N₄ 表面，使产氢活性提升 9 倍，证实量子点结构对载流子分离起到了促进作用。此外，量子点表面丰富的低配位原子有助于增强对塑料分子的吸附与活化，Zhao 团队利用 CQDs/TiO₂ 催化剂在葡萄糖重整中同时实现高选择性与高产氢速率，进一步验证了量子点在分子转化中的独特优势。

而缺陷工程是另一种有效调控策略。通过引入硫空位来调整材料的电子结构，从而提升催化活性：一方面，空位作为电子捕获中心抑制载流子复合；另一方面，其诱导的局部电子富集有助于塑料分子的活化。Hang 等人通过制备富含硫空位的 Cd_{0.6}Zn_{0.4}S 固溶体，使产氢速率大幅度提升，相较于原始 CdS 活性增加了 691 倍。类似地，Zhou 和 Ye 等人分别在 ZnS 和 MoS₂ 中引入硫空位，显著提高了材料的光吸收能力和载流子分离效率。这些研究表明，通过精准调控缺陷浓度，可有效优化催化剂的能带结构和表面反应活性。

本论文基于上述分析，采用一步溶剂热法，通过改变硫前驱体来制备具有不同硫缺陷浓度的 CdS 量子点。利用拉曼光谱、EPR 和 XPS 系统分析了缺陷浓度对材料结构的影响，发现以硫化钠为前驱体制备的 CdS-NS 具有最优缺陷浓度。在无助催化剂条件下，CdS-NS 对 PET 光催化重整表现出优异性能：甲酸酯、乙酸酯和氢气的生成速率分别达 870、90 和 1771 $\mu\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$ 。

D21-PO09

Pd/OMS-2 催化剂中铁改性对低温 MnO 生成及其高效 CO 选择性催化还原（SCR）性能的研究

李庆伟、陈凯婷、韩新宇、张一波*、杨向光

中国科学院赣江创新研究院

用 CO 选择性催化还原 NO_x (CO-SCR) 是一种高效、经济的 NO_x 减排技术。为了进一步提高 NO_x 的净化效率, 开发高性能的 CO-SCR 催化剂至关重要。本研究以 K₂Mn₄O₈ 和 OMS-2 为原料, 采用氢还原法制备了 MnO 载体。采用浸渍法制备了双金属 Pd-Fe 负载催化剂 PdFe/K-OMS-2, 并对其在 CO-SCR 反应中的催化活性进行了系统评价。结果表明, 当 Pd 负载为 1 wt%, Fe 负载为 3 wt% 时, PdFe/K-OMS-2 催化剂表现出优异的 CO-SCR 性能, 在 200°C 时保持高效率 (≥90%) 和稳定性, 在 300°C 时具有优异的耐水性。综合表征技术表明, 热处理后 Fe 有利于 OMS-2 在低温下转化为 MnO。因此, 提高 Mn²⁺ 的浓度, 增加 Pd²⁺ 的含量, 促进 Pd 和 Fe 之间的相互作用, 可以显著提高 PdFe/K-OMS-2 催化剂的低温活性。此外, 原位漂移研究表明, 催化剂主要遵循 Mars-van Krevelen (MvK) 机制, 即 NO 和 CO 同时吸附在催化剂表面并随后发生反应。

D21-PO10

电弧等离子体多尺度设计 O-SWCNHs@SiO₂ 核壳异质结构实现可调电磁波吸收性能

解志鹏、张达、梁风*

昆明理工大学

开发高性能电磁波吸收材料对军事装备的生存和人类的身体健康具有重要意义[1], 为了追求更好的电磁兼容性, 多尺度设计材料已成为开发兼具多频段和宽频带的新型吸波材料的有效手段[2]。在此, 采用自下而上的合成方法, 利用直流电弧等离子体快速原位合成了具有超低堆积密度 (23–32 mg cm⁻³) 的二氧化硅包覆氧掺杂单壁碳纳米管 (O-SWCNHs@SiO₂) 吸波材料。其中, SiO₂ 被均匀包裹在 O-SWCNHs 球核的外表面, 形成了一种独特的核壳异质结构。在微观尺度下, SWCNHs 中 O 原子和 Si 原子的原位掺杂增强了偶极极化; 在介观尺度 SiO₂ 壳的引入增加了 SWCNHs/SiO₂ 的极化界面数量, 调节了材料界面极化和阻抗匹配能力。通过多尺度吸波材料设计, SWCNHs@SiO₂ 具有优异的可调电磁波吸收性能。最小反射损耗 (RL_{min}) 峰值可从高频 (13.9 GHz, -61.78 dB) 向低频 (6.48 GHz, -59.85 dB) 移动, 低于 -10 dB 的 RL 曲线可覆盖 88.8% (3.8–18 GHz) 的测量频率。其有效带宽和 RL 均优于大多数含有 SWCNHs 或 SiO₂ 成分的复合吸波材料。总之, 这项研究提出了一种简单而快速的方法来制造核壳异质结构, 这种结构可用作具有可调吸收性能的高效轻质电磁波吸收器。

参考文献:

[1] Z Gao, D Lan, L Zhang, H Wu, Adv. Funct. Mater., 31, 210667, 2021

[2] M Qin, L Zhang, X Zhao, H L Wu, Adv. Sci., 8, 2004640, 2021

D21-PO11

Heralding the Electrification Era of Catalysts: A highly Practical Current-Assisted Catalytic Strategy

Yannan Li, Kaijie Liu, Yibo Zhang*

Ganjiang Innovation Academy

The advent of current-assisted catalysis represents a transformative shift toward the electrification of catalysts, offering a green, efficient, and practical strategy to overcome the limitations of traditional thermal catalysis. This approach leverages low operating voltages (<10 V) to enhance catalytic performance at low temperatures through synergistic electron-phonon interactions. Key advancements include the use of conductive catalysts to achieve low-temperature soot combustion (53% conversion at 75 °C) and selective NO_x reduction (<150 °C), driven by mechanisms such as lattice oxygen release, electron scissor effects, and accelerated molecular collisions. The strategy reduces energy consumption by over 90% while maintaining stability and resistance to environmental interference. Current-assisted catalysis expands application prospects in energy and

environmental sectors, including methane reforming, CO₂ reduction, and chemical looping processes. Future directions involve optimizing electron transfer via atomic-scale engineering, exploring bond-selective catalysis, and integrating machine learning for catalyst design. This innovation paves the way for sustainable industrial transformation and carbon neutrality goals.