



中国材料大会 2024
暨第二届世界材料大会
CMC 2024 & WMC 2024

July 8-11, 2024
Guangzhou, China

B01-光催化材料
B01-Photocatalytic Materials

Organized by

Chinese Materials Research Society

Website: <https://cmc2024.scimeeting.cn>

B01.光催化材料分会

分会主席：李朝升 郝维昌 邹志刚 周勇 涂文广

分会编号-01**B01-K-01****异基元分子结光催化剂**兰亚乾^{1*}

华南师范大学

在人工光合成领域,实现可见光驱动下以水作为牺牲剂的 CO₂ 光还原是最具有挑战性的光催化反应之一。因此,设计和合成有效的光催化剂是至关重要的。与纳米材料相比,金属有机框架(MOF)、共价有机框架(COF)以及各种金属团簇有着明确的分子结构,作为催化剂可以从原子层面阐明活性位点和催化机制,为实现精准催化提供理论和实验依据。近五年来我们课题组设计合成了一系列氧化-还原异基元分子结人工光合作用催化剂。1、合成氧化-还原型共价键框架,多组分协同实现光合作用的人工模拟;2、合成氧化-还原型配位金属有机框架,利用明确单晶结构,探索光生电荷新型传输模式,确定分子级构效关系;3、设计多功能光-有机催化体系,光催化 CO₂ 转化-串联有机催化生成高附加值产品。为构筑高效稳定的晶态人工光合作用催化剂提供了新的策略。

参考文献

- [1] Xia, Y.-S.; Liu, J.*; Lan, Y.-Q.* Nat. Synth. 2024, 3: 406.
- [2] Zhang, L.; Liu, J.; Lan, Y.-Q.* Acc. Chem. Res. 2024, 57: 870.
- [3] Yang, M.-Y.; Lu, M.*; Lan, Y.-Q.* J. Am. Soc. Chem. 2024, 146: 3396.
- [4] Zhang, L.; Liu, J.*; Lan, Y.-Q.* Proc. Natl. Acad. Sci. 2022, 119: e2210550119.

B01-I-01**高效人工光合成树叶：从电催化剂设计到光化学转换**

程合锋*

山东大学

随着人们对能源需求的不断升级,可持续能源的发展至关重要。模拟自然界植物的光合作用,人工光合成可以将二氧化碳(CO₂)还原为高附加值的碳氢燃料是缓解温室效应和能源危机,是实现碳中和的一种有前景的策略。然而 CO₂ 分子活化比较困难,同时 CO₂ 还原是一个多电子-质子耦合过程,涉及大量的中间产物,还面临析氢反应的竞争作用,导致了 CO₂ 催化还原到特定产物的活性和选择性较差。针对上述问题,近期我们通过 CO₂ 还原电催化剂的结构设计出发,定向调控材料的电子态,提高了太阳能驱动的 CO₂ 还原性活性和选择性[1-4]。基于电子结构调控策略,我们制备了一种富电子的 Bi 纳米片(Cu-Bi 双金属纳米结构),其中 Cu 作为电子给体向 Bi 电子受体提供电子,这种富电子 Bi 纳米片能够有效促进 CO₂ 的活化,实现了 13.7%的太阳能到化学能(甲酸盐)的转化效率。通过光转换系统的构建,高效的人工树叶为高附加值化学品和燃料的合成提供了新的路径。

参考文献

- [1] Li, Z.; Sun, B.; Xiao, D.; Wang, Z.; Liu, Y.; Zheng, Z.; Wang, P.; Dai, Y.; Cheng, H.; Huang, B.; Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62: e202217569.
- [2] Sun, B.; Li, Z.; Xiao, D.; Liu, H.; Song, K.; Wang, Z.; Liu, Y.; Zheng, Z.; Wang, P.; Dai, Y.; Huang, B.; Thomas, A.; Cheng, H.; Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202318874.
- [3] Li, Z.; Gao, Y.; Meng, X.; Sun, B.; Song, K.; Wang, Z.; Liu, Y.; Zheng, Z.; Wang, P.; Dai, Y.; Cheng, H.; Huang, B.; Cell Rep. Phys. Sci. 2022, 3: 100972.
- [4] Sun, B.; Wang, X.; Li, Z.; Liu, H.; Jiang, W.; Song, K.; Wang, Z.; Wang, P.; Liu, Y.; Zheng, Z.; Dai, Y.; Huang, B.; Cheng, H.; Chem Catal. 2024, 4: 100862.

B01-I-02**类金属 TiN 光催化 CO₂ 转化研究**

汪思波*

福州大学

利用光催化技术直接将 CO₂ 还原成碳基燃料是实现碳中和的理想途径之一^[1-4],但目前光催化还原 CO₂ 的效率远低于实际应用的需求。通常认为,光生电荷分离是 CO₂ 光还原的关键科学问题。同时,CO₂ 分子的吸附与活化也是影响光催化还原 CO₂ 效率的一个重要因素。针对以上关键科学问题,主要开展了以下研究工作。

利用类金属光催化剂的高导电性促进光生电荷分离,并结合催化活性位点的表面修饰,强化 CO₂ 分子的吸附与活化。通过 TiO₂ 原位氮化、Ru 单位点表面修饰等,制备 Ru/TiN 类金属光催化剂,实现高效红外光诱导的 CO₂ 还原耦合 H₂O 氧化制合成气和 O₂^[5]。

参考文献

- [1] S. Wang, et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 17305-17308.
- [2] S. Wang, et al., *Energy Environ. Sci.* 2018, 11, 306-310.
- [3] S. Wang, et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 5037-5040.
- [4] S. Wang*, et al., *Adv. Energy Mater.* 2023, 13, 2203290.
- [5] S. Wang*, et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 27415-27423.

B01-O-01**活性位点精细调控增强光热还原 CO₂ 高附加值转化**

宁尚波、叶金花*

河北大学

以太阳能驱动的光热催化结合了光化学和热化学作用的特点,已成为解决能源与环境问题最有前景的新技术之一,而这一技术应用的关键仍是高性能催化材料的开发。针对 CO₂ 还原过程中存在的反应分子靶向活化难、催化活性低和产物选择性差等问题,设计多元组分的协同催化体系,有望为太阳能到化学能的高效转化提供一种新思路^[1-5]。①通过原位光热活化构筑 Co⁰-Co^{δ+}结构,作为 C₁ 中间体的 C-C 耦合的协同催化活性位点^[1]。实验和理论计算结果证实了界面双活性位点实现有效吸附、活化 CO₂,通过 Co⁰ 位点生成 C₁ 中间体,而引入 Co^{δ+} 的缺电子态能有效降低关键 CHCH* 中间体的反应能,从而促进 C₂₊ 低碳烯烃的生成。②利用 Cu 修饰 CoFe 合金催化剂,成功实现逆水煤气变换和费托合成串联反应,从而实现光驱动 CO₂ 加氢制备高选择性低碳烯烃 (C₂H₄、C₃H₆ 和 C₄H₈)。在流动式单反应器中,太阳光驱动 CO₂ 加氢合成低碳烯烃 C₂₋₄ 选择性达 56%。以上研究提供了光热催化剂设计应用于光还原 CO₂ 转化为 C₂₊ 高附加值的新思路。

参考文献

- [1] S., Ning, H. Ou, D. Wang,* J. Ye* et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, 135, e202302253.
- [2] S. Ning*, J. Wang, X. Wu, J. Ye* et al. *Adv. Funct. Mater.* 2024, 10.1002/adfm.202400798.
- [3] S. Ning, H. Xu, S. Ouyang,* J. Ye et al., *ACS Catal.*, 2020, 10, 4726-4736.
- [4] S. Ning, S. Ouyang, J. Ye* et al., *Appl. Catal. B: Environ.*, 2022, 310, 121063.
- [5] H. Ou,# S. Ning,# J. Ye,* D. Wang, Y. Li* et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 134, e202206579.

B01-O-02**长余辉材料用于全天候光催化 CO₂ 还原**

裴浪*、马占峰、余英强

杭州电子科技大学

光催化反应强烈依赖于太阳光驱动,太阳能辐射受昼夜、区域或季节等因素影响,具有间歇性或不稳定性,导致光催化 CO₂ 还原反应在下雨、阴天、雾(霾)、夜晚等暗光环境下难以持续工作。长余辉材料又名夜光材料,其特点在于能够将外界光辐照能量存储于材料陷阱中,随后在光照停止后逐步以光的形式释放储存的能量。受此启发,设想利用长余辉材料作为光催化剂,在光照时有效吸收光子并驱动催化反应,同时将多余的光生电荷捕获并储存在陷阱中。在暗态下,利用其余辉效应将储存的电荷逐渐释放至材料表面,从而有望延长光催化的反应时间,甚至实现全天候光催化反应。然而,如何成功激活长余辉材料催化

活性，同时兼具余辉材料高效电荷存储性能，成为实现这一设想的关键挑战。本工作选择稀土离子 Eu^{2+} 、 Dy^{3+} 掺杂的 $\text{Sr}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$ 硅酸盐长余辉材料为研究对象，利用其本征缺陷及稀土离子掺杂缺陷充当电荷存储中心及催化活性位点，在单一材料上实现催化活性和电荷存储双功能耦合，开展了基于太阳能吸收-电荷存储/释放以及 CO_2 还原特性的“储光”型全天候光催化材料的筛选、设计和应用研究。该工作为未来设计合成高活性、高电荷存储能力的余辉材料，从而实现全天候光催化 CO_2 转化提供了新的理论和实验支撑。

B01-I-03

混合微波退火合成高性能光电极

张和民*

四川大学

太阳能光电催化分解水制氢或还原二氧化碳转化为碳氢燃料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。

混合微波退火（Hybrid microwave annealing, HMA）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 在光电催化方面的应用：1）“HMA 结合模板法”解决了高结晶性和纳米结构共存的难题，实现了 Fe_2TiO_5 光电极的性能突破^[2]；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]；3）“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^[4, 5]；4）HMA 高效修复了氮离子植入的二氧化钛，提高了光电催化性能^[6]；5）HMA 结合 Ta 离子的预掺杂，制备了高结晶性 p-t-n 异质结（ $\text{Ta}:\text{Fe}_2\text{O}_3@\text{CaFe}_2\text{O}_4$ ）^[7]；6）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^[8]；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。HMA 为光电极材料的掺杂、修复和新型半导体材料的合成提供了新的技术平台。

参考文献

[1] Zhang H, et al. *Acc. Chem. Res.*, **2019**, 52, 3132-3142.

[2] Zhang H, et al. *Nano Energy*, **2019**, 62, 20-29.

[3] Zhang H, et al. *Nat. Commun.*, **2020**, 11, 4622.

[4] Zhang H, et al. *Adv. Funct. Mater.*, **2019**, 29, 1805737.

[5] Zhang H, et al. *ACS Catal.*, **2019**, 9, 1289-1297.

[6] Zhang H*, et al. *J. Phys. Chem. Lett.* **2022**, 3878-3885.

[7] Zhang H*, et al. *ACS Catal.*, **2023**, 13, 7002-7012.

[8] Zhang H*, et al. *Appl Catal, B.*, **2024**, 342: 123465.

B01-I-04

零碳能源的光-电-化学高效转换

郑建云*

湖南大学

光电化学能直接实现太阳能转化为化学能，弥补光热转换和光伏转换的瞬时性和难储存/运输等问题，是太阳能分布式发展和清洁化利用的理想途径。光电化学合成的“绿氨”是一种清洁的零碳能源载体，可长期稳定地储存太阳能和氢能，实现长距离的能源运输和应用，符合国家“双碳目标”战略需求。在零碳能源的光电化学转换体系中，当前的研究主要存在着两大难题：光电极固有问题和氨合成反应固有问题。针对上述关键科学问题，本人聚焦光生载流子动力学行为、光电极材料防护工程和固液界面催化性能，开展光电化学固氮合成氨研究，主要的创新点如下：阐明和增强光电极的载流子动力学行为：研究光电极内部的光生载流子动力学行为，揭示了光生载流子以极化子形式进行转移和储存，建立了额外内场为载流子的定向分离和转移提供驱动力，为理性设计高效光电极指明了新的研究方向。设计和开发稳定的层级结构光电

极：针对光电极在工况下易腐蚀和失效的问题，开发了系列功能明确的层级结构光电极，分别探究了吸光器、保护层和助催化剂对光电化学稳定转换行为的影响规律，研究缺陷工程对光电极稳定性和效率的调控机制，为获得实用化的光电极提供理论支撑和技术指导。探究光电化学合成氨的反应机制和路径：分析光电化学氮还原合成氨的反应路径，阐明了光电极表面吸附、活化和氯化氮气分子的活性位点，明确了光电极的表面微环境与催化活性之间的构效规律，为光电化学合成绿氨指明路径。

B01-O-03

表面修饰对氧化铁光电催化氧化甘油性能的影响

赵新*

中国农业大学

表面工程作为一种增强光电催化性能的有效策略，在能源和环境应用领域展现出巨大的发展潜力。本文探讨了表面修饰在提高光电催化甘油氧化效率和选择性方面的影响。本研究以 Fe_2O_3 光阳极材料为研究对象，通过对 Fe_2O_3 光阳极表面进行不同氧化物修饰发现 Ni 修饰的效果最佳，阻抗测试分析表明其界面电荷转移电阻显著降低，反应过电位也得到明显改善，并且甘油氧化为甲酸的产物选择性提高一倍。对表面状态的原位电化学表征表明，表面修饰确实可以在光催化剂表面引入活性位点，从而提高甘油氧化的效率和选择性。该研究为高效、可持续的光电催化系统的设计和优化提供了参考。

B01-O-04

Enhanced Photocatalytic Water Splitting Activity of High-Concentration Surface Hydroxyl-Modified $\text{TiO}_2/\text{CuO}/\text{Cu}$

Hong Qian, Binxia Yuan*, Yuhao Liu, Rui Zhu

Shanghai University of Electric Power

This article utilizes commercial TiO_2 (P200) as the substrate and employs a simple hydrothermal calcination method to load Cu quantum dots and CuO nanoparticles. XPS analysis reveals that the hydroxyl oxygen content in the TC-300°C sample reaches as high as 53.7%, which is 2.5 times that of T. Fourier transform infrared characterization also confirms the presence of a high concentration of hydroxyl groups in the sample. After 4 hours of catalytic reaction under visible light, the H_2 production rate of TC-300°C reaches $182.68 \mu\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$, which is 3.3 times that of T. Furthermore, the production rate of the sample increases with the concentration of hydroxyl groups, indicating that the adsorption of hydroxyl groups is conducive to enhancing the photocatalytic activity of the sample. Density functional theory (DFT) calculations suggest that the rate-limiting step (RLS) in the oxygen evolution reaction (OER) occurs at $* \rightarrow *OH$ transition. The presence of hydroxyl groups in TC-OH itself reduces the reaction barrier and enhances the catalytic activity. Additionally, the adsorption energy of TC-OH for H_2O is lower by 0.27 eV compared to TC, and the Gibbs free energy of H^+ adsorption on TC is lower by 0.29 eV compared to T, confirming that composite materials with high concentrations of hydroxyl groups exhibit better catalytic activity.

B01-O-05

在超薄 $\text{WS}_2/\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ 纳米片中构建 S 型异质结构以提高光催化产氢性能

刘芊*

山东科技大学

金属硫化物基光催化剂是经济、环保且可再生的。然而，光电子与空穴的快速复合和太阳能利用效率低仍然是一个巨大的瓶颈。本工作设计了二维/二维(2D/2D) S-scheme 的 $\text{WS}_2/\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ 异质结构，超薄纳米片穿插在相邻组分之间。大而紧密的 s 型异质结促进了界面电荷的分离/转移，并优化了可用的氧化还原电位。此外，超薄的 2D/2D 异质结构保证了大的比表面积、最大的界面协同作用和表面活性位点的有效暴露。结果表明，在模拟太阳光照下，2 wt% $\text{WS}_2/\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ 的光催化产氢率为 $30.21 \text{ mmol} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ ，在 370 nm 单色光下的表观量子效率为 56.1%，远远超过原始 $\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ ($6.65 \text{ mmol} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$)。DFT 计算表明，异质结的存在

有利于在界面处形成内置电场，其带边弯曲和库仑相互作用可以抑制 $\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ 的 CB 与 WS_2 的 VB 空穴的复合， $\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ 中光生电子的强还原能力和 WS_2 中光生空穴的强氧化能力得到了保留，在 $\text{WS}_2/\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ 体系中实现了较高的电荷分离/转移效率。我们的工作强调了将形态学工程和 S 型异质结设计相结合用于高效低成本光催化剂的重要性。

B01-K-02

The Irregular Physics of H_2O and H-O Bond Splitting

Chang Q Sun*

Dongguan University of Technology

The theory of Hydrogen Bond (O:H-O) Cooperativity and Polarizability (HBCP) has enabled exploration of the core physics behind irregularities of water and ice. The key thrust is the interplay of O:H attraction and O—O repulsion that drives the O:H—O bond to relax its segmental lengths, cohesive energies, vibration frequencies, and specific heats cooperatively, establishing an efficient set of parameters to feature the bonding and electronic dynamics in the frequency-space-time domains. When perturbed, the O:H nonbond always relaxes more than the H—O bond in contrasting directions. Mechanical compression or Liquid cooling shortens and stiffens the weaker O:H nonbond while doing the stronger H—O bond contrastingly; however, Quasisolid (QS) cooling, molecular undercoordination, or electrostatic polarization shows the contrast effect of compression and liquid cooling, associated with strong polarization. Substituting the “O:” with the under-coordinated catalytic atomic dipole, M^{P} , atomic vacancy V, surface $\text{H}_2\text{O}_{\text{surf}}$, or the $\text{HO}_{\text{-ads}}$ adsorbed on metal could form the dipolar-substituted X:H-O bond that follows the HBCP regulation. The interplay of the X:H attraction and X: \rightleftharpoons :O repulsion stretches the H-O toward dissociation. The single-atom catalysts follow the BOLS-NEP (undercoordinated bond contraction and nonbonding electron polarization) regulation and the X:H-O bond cooperative relaxation dictates the catalytic dynamics.

B01-I-05

金属氧化物纳米阵列光电化学性能的优化策略

林仕伟*

海南大学

金属氧化物半导体，如 TiO_2 和 ZnO ，不仅具有稳定性好、环保、价格低廉等优点，而且可以通过优化工艺条件，轻易制备成一维纳米阵列结构，包括纳米线、纳米棒和纳米管等。一维纳米阵列可以为光生电荷的有效分离和快速传输提供便捷的途径，使其成为光电催化电极的理想选择。然而，金属氧化物光电催化电极常常存在诸如大的禁带宽度和光生电荷量子效率低等缺点。因此，采取适当的结构优化措施来提高光电催化性能是至关重要的。除了利用 CdS 、 CdSe 和 PbS 等窄带隙半导体来敏化金属氧化物纳米阵列外，构建氧化纳米阵列内部的梯度能级/内建电场以促进光生载流子的分离和转移也被认为是提高光电催化性能的重要优化策略。本工作通过具体实例说明了构建内建电场在纳米阵列结构中优化光电催化性能的有效性。这些实例包括通过热处理在 TiO_2 纳米管阵列中构建同质相结，通过在 TiO_2 纳米棒阵列的水热生长过程中调节 Ti^{3+} 自掺杂浓度引入梯度能级，以及利用 p 型 ZnO 纳米棒阵列中的压电效应增强内建电场，等等。这些结果表明，在纳米阵列中构建内建电场可以显著提高载流子的传输和传输性能，是开发和优化光电催化性能的一种重要方法。

参考文献：

- [1] C. Ai, P. Xie, X. Zhang, X. Zheng, J. Li, A. Kafizas, S. Lin, ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2019, 7, 5274-5282.
- [2] C. Cao, X. Xie, Y. Zeng, S. Shi, G. Wang, L. Yang, C. Wang, S. Lin, Nano Energy, 2019, 61, 550-558.
- [3] H. Si, L. Zou, G. Huang, J. Liao, S. Lin, Journal of Colloid and Interface Science, 2023, 630, 888-900.
- [4] H. Si, G. Huang, J. Liao, A. C. Fisher, S. Lin, ACS Applied Materials & Interfaces, 2023, 15, 11866-11874.

[5] G. Huang, H. Si, L. Zou, H. Zhang, J. Liao, S. Lin, ACS Applied Nano Materials, 2024, 7, 715-725.

B01-I-06

多元能量协同策略提升光催化性能

寇佳慧*

南京工业大学

光催化技术不仅可以利用太阳能催化分解水制备清洁新能源氢气，还可以利用太阳能降解有机污染物、还原重金属离子和实现自清洁等，因而也是一种理想的环境污染治理技术。虽然光催化在能源及环境保护领域中均显现出巨大的应用前景，但是光催化的产业化面临着瓶颈问题，即光生载流子的分离传输效率低。因此针对上述瓶颈，提出利用光催化体系中存在的多种能量来加速光生载流子的分离传输，大幅度提升了光催化材料的活性。主要的研究如下：（1）提出利用自然界中存在的低密度能量（水流能、风能等）来驱动压电内建电场的再生继而长效增强光催化性能，使其具有更高的实用价值。（2）利用微流控技术将热释电基底、光热材料与光催化剂进行复合，构筑了半浸入式热收集型热释电-光热-光催化复合微米纤维系统，实现了红外光响应光生载流子驱动器（热释电电场）增强光催化分解水制氢性能的显著提高。（3）针对传统光催化模式传质效率低，能量利用率低的问题，构筑了超薄水界面光催化模式。优化了光催化过程中的能量与质量传递过程，整合有效增益光催化反应的系统因素，协同增强了光催化制氢效率。

B01-O-06

光重整木质纤维素生物质制氢研究

元勇军*、程荃、张福广、马弛

杭州电子科技大学

设计一种能够将水分解为氢气和氧气的光催化剂是一个很大的挑战，研究人员一般选用特定的产氢、产氧半反应牺牲剂来提高催化反应的效率^[1]。但由于牺牲剂成本较高，极大降低了制氢半反应体系的经济价值。因此，设计和使用廉价的牺牲剂是发展低成本太阳能制氢半反应的关键。木质纤维素生物质是地球上最丰富的可再生资源，被认为是构建碳中和经济社会的理想能源物资。太阳能光重整木质纤维素生物质制氢技术，以太阳能为驱动力在温和的条件下将生物质能转换为氢能，是生物质能源化的理想途径之一。目前报的光重整木质纤维素生物质制氢体系制氢效率低，主要原因是缺少高效的催化剂材料。当前，开发可实现快速光驱动木质纤维素生物质分解制氢的高效催化剂是该研究领域的难点。

为了开发高效光重整木质纤维素生物质制氢材料，我们构建了厚度约为 2.1 nm 超薄锐钛矿相 TiO₂ 纳米片，(001)暴露面比例高达 94.5%，该光催化剂在光催化重整木质纤维素制氢应用中的展示了高的活性。光催化制氢测试表明超薄(001)面暴露的超薄锐钛矿相 TiO₂ 纳米片负载 1.0% Pt 在 α -纤维素和杨树木屑水溶液中产 H₂ 速率分别为 275 和 26 $\mu\text{mol}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{g}^{-1}$ ^[2,3]。在 α -纤维素水溶液体系中 380 nm 处的表观量子产率为 1.89%，并且具有较好的循环稳定性。

此外，为了提高光的利用效率，我们构建了基于 MoS₂ 催化剂的宽光谱响应光热催化分解木质纤维素制氢体系^[4]。通过调控 MoS₂ 层数剂，使 MoS₂ 暴露出更多的 Mo 边缘，增加了 MoS₂ 催化剂的 Lewis 酸性位点数量，实现了光热催化分解杨树木屑、竹子、水稻秸秆、玉米芯和水稻壳等木质纤维素生物质制氢。实验结果表明，在 300 W Xe 灯光照下优化的 MoS₂ 催化剂在杨树木屑水碱性水溶液中光热催化制氢速率及太阳能-氢能转换效率（STH）分别达到了 3661 $\mu\text{mol}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{g}^{-1}$ 和 0.18%。

参考文献

- [1] Y. J. Yuan.; N. Lu.; L. Bao.; R. Tang.; F. G. Zhang.; J. Guan.; Ha. D. Wang, Q. Y. Liu, Q. Cheng, Z. T. Yu, Z. G. Zou. ACS Nano 2022, 16, 12174-12184.
- [2] Q. Cheng, Y. J. Yuan, R. Tang, Q. Y. Liu.; L. Bao, P. Wang, J. Zhong, Z. Zhao, Z. T. Yu, Z. G. Zou. ACS Catal. 2022, 12, 2118-2125.
- [3] Z. X Huang, C. Ma, F. G. Zhang, Q. Cheng, Q. Y. Liu, Y. J. Yuan, X. F. Zhang. J. Mater. Chem. A, 2023, 11, 7488-7497
- [4] C. Ma.; M. Cheng.; Liu, Q. Y. Liu.; Y. J. Yuan.; F. G. Zhang.; N. X. Li.; J. Guan.; Z. K. Shen.; Z. T. Yu, Z. G. Zou. Nano Lett. 2024, 24, 331-338.

B01-O-07**层状晶体结构的半导体基光催化剂光生载流子行为调控增强 CO₂ 还原性能研究**

胡建强*、杨振

江西师范大学

层状晶体结构半导体 (ZnIn₂S₄、Bi₄O₅I₂ 等) 具有带隙窄、化学稳定性好、易于合成纳米片等优点成为光催化 CO₂ 还原领域研究热点。然而, 其存在可见光吸收能力弱、光生载流子严重复合、缺乏足够有效活性位点 (不利于反应分子的吸附与活化) 等问题。为此, 我们以促进光生电荷分离与传输为核心来提升其光催化 CO₂ 还原性能。取得创新研究结果如下:

1. 通过原位生长法构建了界面 Mo-S 键连的 Bi₂MoO₆@ZnIn₂S₄ 分层 S 型异质结构光催化剂^[1]。界面 Mo-S 键可以促进光生电荷 (通过 S 型机制) 分离和转移。此外, 其分级异质结构可以提高可见光响应能力, 并提供大量活性位点, 有利于 CO₂ 的吸附与活化: 不仅可以将 ZnIn₂S₄ 的吸热决速步 (CO₂*+H₂生成 COOH*) 转化为放热反应过程, 降低总体活化能势垒, 而且可以促进 CO* 从 ZnIn₂S₄ 表面脱附。因此, 最佳光催化剂具有高效、高选择性的还原 CO₂ 制 CO 性能 (93.1% 和 23.11 μmol g⁻¹h⁻¹)。

2. 构筑了一种 Bi₄O₅I₂@Cu 光催化剂^[2]。利用 Cu 纳米颗粒的等离子体共振效应与 Bi₄O₅I₂/Cu 肖特结的协同作用, 在可见光辐照且不使用牺牲试剂的情况下, 最优光催化剂显著提高了 CO 生成速率 (7.34 μmol g⁻¹h⁻¹), 约单一 Bi₄O₅I₂ 的 13.1 倍。

参考文献

[1] Jianqiang Hu* and Zhen Yang*, et al, *Chem. Eng. J.*, 2024, 480, 148036.

[2] Jianqiang Hu* and Zhen Yang*, et al, *ACS Sustainable Chem. Eng.*, 2023, 11, 17168.

B01-O-08**Partial Decoupling of Redox Chemistry for Efficient and Highly Selective Amine Photoconversion to Imines**

刘望喜

南京大学

光催化伯胺氧化偶联为亚胺同时生成氢气是一种具有前景性的反应。然而, 这种反应通常受到光催化剂自身的载流子分离差和氧化偶联产物亚胺易发生加氢还原成仲胺的限制。这里提出了一种氧化还原化学解耦的策略, 即将氧化与还原反应分离在光催化剂的不同组成成分上, 并以 CoP 内核和 ZnIn₂S₄ 外壳 (CoP@ZnIn₂S₄) 组成的同轴电缆纳米棒光催化剂来验证上述观点。通过原位 XPS、SPV 和 TAS 分析, 在 CoP 内核和 ZnIn₂S₄ 外壳之间发生了定向和超快光生载流子分离。在光催化苄胺氧化偶联反应中, CoP@ZnIn₂S₄ 生成 N-苄烯丁胺 (NBI) 的反应速率比 ZnIn₂S₄ 高 48 倍, 选择性高达 99%。原位红外揭示出偶联反应的中间体为苄亚胺, 并通过同位素质谱实验证实 NBI 加氢还原生成二苄胺 (DBA) 的反应中质子部分来源于溶剂中的 H₂O。

B01-I-07**Single-Atom Catalysts: Emerging Multifunctional Materials towards Sustainable Energy Conversion**

Huabin Zhang

King Abdullah University of Science and Technology (KAUST)

Increasing demand for sustainable energy has accelerated research on various renewable technologies. Developing catalytic energy conversion technologies for replacing the traditional energy source is highly expected to resolve the fossil fuel exhaustion and related environmental problems. Exploring stable and high-efficiency catalysts is of vital importance for the promotion of these technologies. Single-atom catalysts (SACs), containing single metal atoms anchored on supports, represent the utmost utilization of metallic catalysts and thus maximize the usage efficiency of metal atom.¹ However, with the decreasing of particle size, the surface free energy increases obviously, and tends to aggregate into clusters or particles. Selection of an appropriate support is necessary to interact with isolated atoms strongly, and thus prevents the movement and aggregation of isolated atoms, creating stable, finely dispersed active sites. Furthermore, with uniform single-atom dispersion and

well-defined configuration, SACs afford great space for optimizing high selectivity and activity.

Our research interest focuses on the development of single-atom catalysts with the particular configuration for sustainable energy conversion, including photocatalysis, electrocatalysis, and thermal catalysis.² His research also extends to the operando investigation for monitoring the structural evolution of the reactive centers, as well as the mutual interaction between the reactive center and reactant in the catalytic process. The widespread adoption of SACs in diverse catalytic reactions will be comprehensively introduced.^{3,4} By presenting these advances and addressing some future challenges with potential solutions related to the integral development of catalysis over SACs, we expect to shed some light on the forthcoming research of SACs for catalytic energy conversion.

Reference:

1. Zhang H, Liu G, Shi L, Ye J. Single - atom catalysts: emerging multifunctional materials in heterogeneous catalysis. *Adv. Energy Mater.* **8**, 1701343 (2018).
2. Feng C, Wu ZP, Huang KW, Ye J, Zhang H. Surface Modification of 2D Photocatalysts for Solar Energy Conversion. *Adv. Mater.*, 2200180 (2022).
3. Xue Z-H, Luan D, Zhang H, Lou XWD. Single-atom catalysts for photocatalytic energy conversion. *Joule*, (2022).
4. Duan L, *et al.* A molecular ruthenium catalyst with water-oxidation activity comparable to that of photosystem II. *Nat. Chem.* **4**, 418-423 (2012).

B01-I-08

光催化研究中的 AI 和机器人技术

朱熹*

香港中文大学（深圳）

近年来，人工智能（AI）和机器人技术在光催化研究中的应用取得了显著进展。光催化作为一种利用光能驱动化学反应的绿色技术，广泛应用于环境治理和新能源领域。然而，传统光催化材料的设计与优化过程通常耗时费力，难以满足快速发展的实际需求。AI 和机器人技术的引入为光催化研究带来了革命性的变化。AI 算法能够通过大数据分析和机器学习，快速筛选和预测高效光催化材料及其性能；机器人技术则可以自动化实验操作，提高实验效率和精度，实现高通量筛选和实时监测。本报告介绍 AI 和机器人在光催化材料设计、反应机制研究以及实际应用中的最新进展，探讨了这些技术在光催化领域的潜在应用价值和未来发展方向。

B01-I-09

自然光热催化构建与应用

李亚光*

河北大学

光热催化具有~100%太阳光吸收和高催化活性的优点，广泛应用于二氧化碳资源化。然而光热材料在低密度自然太阳光辐照下的温度过低（普遍低于 100 °C），不能驱动工业催化，使得光热催化难以实际应用。在此，我们通过梯度薄膜消光原理设计光热材料，实现太阳光谱高效吸收与红外辐射干涉消光的协同，使得光热材料的标准太阳光辐照温度达到 288 °C，是传统光热材料辐照温度的~3 倍，实现了自然太阳光驱动的光热产氢、CO 氧化、NO_x 脱除、VOCs 燃烧等。在此基础上提出异质光热材料概念，实现高效太阳光谱吸收和超低红外热辐射的耦合，使得光热材料的标准太阳光辐照温度提升到 317 °C，开发了二维高熵光热催化剂，通过新型催化剂与光热系统的耦合，在自然光热 CO₂ 资源化、化合物制氢等方面表现出优越的性能。

B01-O-09

Phosphorus Regulates the Coordination Environment of Cobalt Atomic Sites for Boosting Photocatalytic H₂ Evolution

Yuqi Zhao*

Shandong University of Science and Technology

As the environmental and energy crisis continues to worsen, water splitting for hydrogen production is regarded as a promising solar energy utilization method. Over the past half century, tremendous efforts have been made to develop efficient photocatalysts for hydrogen collection. Most high-performance photocatalysts typically require the addition of precious metals as co catalysts, but the high cost and scarcity of precious metal materials limit their large-scale commercial applications. Currently, there remains a persistent demand for the advancement of transition metal-based photocatalysts that function effectively without the need for noble metal co-catalysts.

Recently single-atom catalyst (SACs) have attracted considerable interest in the variety of photocatalytic application owing to the maximum utilization of metal atoms and well-defined active sites, and unique electronic structures. Single atom catalysts (SACs) with metal sites of atomic dispersion on specific carriers are emerging materials in the field of catalysis. Modifying the local coordination environment stands as a crucial factor influencing catalyst performance. The manipulation of the catalyst's coordination environment can enhance its catalytic activity, selectivity, and stability. Significantly, the adjustable local coordination environment of SACs provide promising opportunity to tailor electronic structures of catalytic sites. However, with the dispersion of the catalyst at the atomic level, the surface energy significantly increases, leading to a tendency towards aggregation. Additionally, SAC still has low metal loading and tends to agglomerate, partly due to a low support surface and weak interaction between metal atoms and the matrix. This hinders the further development and practical application of SAC. Therefore, it is crucial to design and construct a suitable scaffold with a large surface area and strong coordination ability to anchor high content SAC to ensure its stability during preparation and subsequent reaction processes. Metal-organic frameworks (MOFs), constructed from various organic ligands and coordinated inorganic nodes, with ultra-high surface area, customizable composition and functionality, and adjustable pore structure. In the past years, metal organic frameworks have been turn out to be promising precursors for the manufacturing of SACs. Individual metal atoms can be efficiently acquired on carbon through a straightforward pyrolysis process conducted on MOFs or MOF composites. Polymer nitride carbon (C_3N_4) consists of a continuous network of carbon and nitrogen atoms in an alternating sequence or position, and is a commonly used substrate for photocatalytic loading of single metal atoms.

The strong coordination bonds between metal species and coordination atoms with lone electron pairs such as N, O, and S play a crucial role in preventing atomic aggregation and achieving atomic level dispersion catalytic structures. However, atoms with high electronegativity such as C, N, O, and S may cause coordination metal atoms to become highly oxidized, leading to poisoning or deactivation of single atom active centers, and their interactions are too weak to stabilize single atoms. Based on these reasons, we chose P atoms with low electronegativity to construct electron rich metal atom centers with optimized electronic properties and chemical activity.

Phosphorization was utilized to replace the carbon atoms anchoring the Co single atoms (Co SA) formed from the collapsed MOF, with the phosphorization duration serving to regulate the amount of C substitution and adjust the electronic structure of Co SA. The atomic dispersion of the Co site was confirmed through XRD and aberration-corrected transmission electron microscopy, while the coordination environment of Co SA was determined using XPS and synchrotron radiation. The differential charge density, Bader charge, and hydrogen adsorption Gibbs free energy for different coordination environments of Co SA were obtained through theoretical calculations. The comprehensive characterization provided conclusive evidence that the replacement of C coordination with P coordination significantly enhanced the HER performance of the material. Based on the experimental findings, the hydrogen evolution rate of the four-coordinated Co single atoms supported on C_3N_4 (Co-P₄/C₃N₄) that we synthesized reached 13.511 mmol g⁻¹h⁻¹, a remarkable 124-fold increase compared to the original C₃N₄ (0.109 mmol g⁻¹h⁻¹). Additionally, the apparent quantum efficiency at 380 nm reached 28.45%.

B01-O-10

缺陷钝化增强硒化铈光电催化分解水制氢研究

关中杰*、彭坤圆、杨建军

河南大学

硒化锑(Sb_2Se_3)由于其合适的带隙、较高的光吸收系数和低廉的价格,是一种很有应用前景的光吸收材料。然而,由于准一维晶体结构的低对称性, Sb_2Se_3 存在大量的本征缺陷,例如最为常见的高密度深能级缺陷硒空位(VSe),导致其太阳能转换效率较低。本文通过精确调节原位退火硒(Se)蒸气压制备了高质量的 Sb_2Se_3 薄膜。调控Se蒸气压不仅可以促进 Sb_2Se_3 晶粒生长,而且抑制了深能级缺陷VSe的形成,并优化了 Sb_2Se_3 与CdS之间的界面能带排列。结果,由于光生电荷复合受到抑制,以及出色的电荷传输和界面提取, Sb_2Se_3 光阴极展现出 $19.5 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}@0 \text{ VRHE}$ 的光电流、 0.40 VRHE 的起始电位和 2.0% 的太阳能-氢转换效率。本研究为有效抑制 Sb_2Se_3 中的深能级缺陷提供了一种新的有效策略。

B01-O-11**金属有机框架 MIL-53(Fe)可见光催化降解 苯扎氯铵(DDBAC)的机理研究**

甘富豪、冀世锋*

上海海洋大学

DDBAC 每年的大量应用给环境带来威胁。本研究通过溶剂法成功制备了铁基金属有机框架 MIL-53 (Fe),将其作为光催化剂成功实现了苯扎氯铵在可见光下的高效降解。通过 SEM、XRD、XPS 以及 UV-vis DRS 等表征方法研究了 MIL-53 (Fe)的形貌、结构以及光催化性能。为了达到光催化降解苯扎氯铵的最佳效率,探究了 MIL-53 (Fe)在不同条件下的光催化降解性能。光催化降解循环实验以及对催化剂反应前后的表征证明了 MIL-53 (Fe)具有较高的稳定性。采用 UHPLC-Q-TOF-MS 确定了降解中间产物,结合 DFT 计算分析了苯扎氯铵可能的降解途径。此外,基于分子轨道理论和自由基淬灭实验证明了氧化降解苯扎氯铵过程中羟基自由基是主要贡献者。通过培养小球藻对 DDBAC 及其中间体的毒性进行了评估,结果表明,Vis/MIL-53(Fe)/ H_2O_2 体系能够实现溶液脱毒。

B01-O-12**半导体材料的表界面调控增强光电催化和光催化制氢性能研究**

刘小磊*

暨南大学

所有的催化反应都是在材料的表界面处进行的,半导体材料的表界面性质将强烈影响其光催化活性。因此,调控半导体材料的表界面性质可有效实现高效的电荷分离、促进电荷传输、提供反应活性位点等,最终实现优异的光催化性能。在本工作中,我们首先构建了 BiVO_4 光阳极-酒石酸强络合的光电化学燃料电池体系,表面强络合界面的构建,可提供电荷传输的通道,有效促进光生载流子的分离,实现酒石酸中化学能的充分释放和转化,最终取得高效的光电化学制氢性能;其次,我们构建了 MoSe_2 助催化剂修饰的 $\text{MAPbBr}_{3-x}\text{I}_x$ 复合材料,异质结的构建可实现 $\text{MAPbBr}_{3-x}\text{I}_x$ 中光生电子快速的向具有丰富析氢位点的 MoSe_2 转移,从而实现光生电荷的高效分离和高效的HI裂解制氢,后续耦合电催化 I_3^- 还原和析氧反应,可实现HI的重复利用和整体的纯水分解制氢。

B01-O-13**CoFeAl-LDH 原位自聚 PDA 包覆策略用于高效稳定光热协同催化硼氢化钠产氢**

蒋焯鑫、杨娟*

江苏大学

NaBH_4 的水解由于氢含量高且安全,被认为是一种前景广阔的制氢形式,这就需要开发高效、可重复使用且价格低廉的催化剂。受自然界的启发,通过原位自聚法设计了聚多巴胺(PDA)包覆的Co-Fe-Al层状双氢氧化物(CoFeAl-LDH@PDA),用于光热协同催化 NaBH_4 产生 H_2 。PDA与CoFeAl-LDH间紧密接触,产生了异质结构,加快了光生电荷转移和电子-空穴分离效率,使得光催化活性大大增强。并且由于PDA的加入,增强了催化剂对光的吸收,使得体系在光热转换中具有更高的热量,促进了光热协同催化产氢。体系制氢率达到 $6546 \text{ mmol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$,是纯CoFeAl-LDH的1.9倍。此外,在PDA保护层的作用下,CoFeAl-LDH@PDA的循环稳定性显著提高,5次循环后仍能保持初始产量的85%。该结构设计合

理, 为进一步促进 NaBH_4 光热催化制氢的实际应用提供了新思路。

B01-I-10

非金属等离子体光催化材料构建

姜在祝*

暨南大学

表面等离子体共振效应 (SPR) 是贵金属材料具有的独特光学性质, 其在增强拉曼散射光谱、化学生物检测、光电探测等领域具有重要的应用。强 SPR 效应可产生高活性热电子在光催化分解水、有机合成、二氧化碳还原等领域有着重要的应用。贵金属的高昂价格和稀有性制约着金属 SPR 光催化剂的应用, 而探索制备具有 SPR 效应的半导体等非金属光催化剂成为理想选择。但非金属 SPR 光催化剂存在载流子浓度低、SPR 效应不稳定的难题, 为此我们课题组提出了一系列的解决途径, 并构建了 $\text{TiO}_2/\text{WO}_{3-x}$, $\text{CdS}/\text{WO}_{3-x}$, $\text{BP}/\text{WO}_{3-x}$ and $\text{MoS}_2/\text{MoO}_{3-x}$ 等复合非金属 SPR 光催化剂, 证明了电子的持续注入可有效提升 SPR 催化效率, 同时验证了其在光催化分解水及二氧化碳还原中具有稳定活性。此外, 我们探索半导体中构建 SPR 效应的有效途径, 提出了富电子能级构造诱导半导体 SPR 效应的研究思路, 并通过在 Bi_2WO_6 中构建多种氧缺陷, 证明了与钨原子相连的氧缺陷可产生储电子能级, 实现载流子富集, 诱导 Bi_2WO_6 产生 SPR 效应, 并发现其 SPR 效应在光催化二氧化碳还原产甲烷中具有决定性作用。为厘清非金属 SPR 热电子与光热效应对增强催化反应的具体协同贡献, 我们课题组设计合成了非金属 SPR 复合光催化剂 $\text{WO}_{3-x}/$ 还原氧化石墨烯 (rGO), rGO 包覆在 WO_{3-x} 表面稳定了氧缺陷, 证明了热电子在增强光催化中的决定性作用, 揭示了热电子可加速异丙醇 C-O 键断裂降低异丙醇脱水反应活化能 (低至 0.37 eV) 的增强催化机制, 在全光谱光激发下实现了高选择性 (100%) 和高效光催化异丙醇脱水产丙烯 (437.5 mmol/g/h), 催化反应速率提升 180 倍。

B01-I-11

金属基光热耦合催化材料 CO_2 转化机制研究

王凤龙*

山东大学

光热催化 CO_2 加氢可以在温和的反应条件下将 CO_2 转化为增值化学品, 引起了全世界的广泛关注。然而, 实现理想的转换效率和高的产物选择性仍然具有挑战性, 基于此我们开展了系列负载型金属光热催化材料研究, 取得了如下结果: (1) 制备了系列 $\text{Ir-CoO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 复合材料, Ir 纳米颗粒的尺寸约为 2 nm 并且均匀分散在 CoO 上。光热催化性能测试表明, 相比于 $\text{CoO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 Ir-CoO 和 $\text{Ir}/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Ir-CoO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 催化剂表现出更高的 CH_4 产生速率, 在 250 °C 和可见光照射下, CH_4 产生速率为 128 mmol gcat⁻¹ h⁻¹, CO_2 转化率为 65%。机理研究表明, $\text{Ir-CoO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 复合材料的优异催化性能源于 Ir 纳米颗粒、CoO 纳米颗粒和 Al_2O_3 载体之间的协同作用。在光照下, CoO 被激发产生光生电子和空穴, 电子进一步转移到 Ir 纳米颗粒表面促进了 H_2 的裂解和 CO_2 的活化。此外, 由于 CoO 优异的光热性能, CoO 还起到了“纳米加热器”的作用, 提高了 Ir 活性位点的局部温度, 加速了反应动力学, 进一步提高了催化性能; (2) 将窄带隙光热半导体作为 Ru 纳米颗粒的分散载体, 设计 $\text{Ru}/\text{MnCo}_2\text{O}_4$ 复合催化剂。Ru 纳米颗粒与 MnCo_2O_4 界面处存在密切电子相互作用, 在可见光照射下, 光生电子从 MnCo_2O_4 转移到 Ru 纳米颗粒, 提高了电荷分离效率, 增强了 Ru 纳米颗粒的负电特性, 促进了反应物分子的强吸附和快速活化。另外, MnCo_2O_4 具有强的光吸收能力和优异的光热转化能力, 作为纳米颗粒的“加热基底”, 与 Ru 纳米颗粒之间形成了更强的局域电磁场, 促进活性位点周围温度的提升, 从而显著提高催化反应速率; (3) 为了进一步降低贵金属使用量和催化材料价格, 采用一步水热合成法制备了单分散且组分可以调控 $\text{Ru}_x\text{Co}_{1-x}$ 合金纳米颗粒并将其负载于氧化物 TiO_2 纳米片表面, 形成复合催化材料。由于金属合金纳米颗粒可调控的电子结构、优化的载流子分离效率、出色的光热转换能力等因素影响, 复合催化材料表现出高效的光热耦合催化 CO_2 转化能力, 组分优化的 $\text{Ru}_{0.88}\text{Co}_{0.12}/\text{TiO}_2$ 复合催化材料表现出优于纯 Ru 催化剂的性能。系列研究结果为设计高效的光热催化 CO_2 甲烷化催化剂和贵金属减量增效利用提供了新策略。

B01-I-12**单原子催化的精细化学品流动合成**

陈仲欣*

香港中文大学（深圳）

多相催化的连续合成是推动绿色制药、医药行业制造升级的关键性技术，特别是发展具有与均相催化剂类似结构特征的单原子催化连续合成技术，有望实现医药衍生生物的普适性高效制备。报告人将从催化剂设计、反应器工程等层面汇报在单原子催化流动合成高值化学品的近期进展。通过在原子层面调控催化剂的配位环境与金属-金属间距，开发具有独特双（多）位点协同机制的催化体系，解决传统单原子催化剂在复杂多步、多组分有机反应中的活性不足问题，并开展在液相有机催化中连续流动合成的方法学研究，实现从基础化学品出发定向合成高价值医药衍生物。在反应器工程层面，搭建可用于光、电、热驱动的多相催化流动反应器，并结合流体动力学模拟等手段理解反应器内部多尺度物理变化，如传质、传热过程对反应器性能的影响，对反应器优化升级，实现精细化学品的克级连续生产。

B01-I-13**外延钒酸铋薄膜及其光催化合成 H_2O_2 性能**

李国强*

河南大学物理与电子学院

钒酸铋($BiVO_4$)是最有前途的可见光光催化剂和光阳极材料之一。我们采用磁控溅射技术在 YSZ (111)衬底上制备出了四方锆石相 $BiVO_4$ 外延薄膜。经过调控衬底温度，掌握了纯的四方锆石相 $BiVO_4$ 的生长条件。另外，通过改变沉积时间，研究了样品的形貌演化规律。随着沉积时间的增加，样品的形貌逐渐由线状，变为带状，最后变为致密连续的片状。在沉积时间为 120 min 的样品中，可以清晰地看到原位生长的四方锆石 $BiVO_4$ 层和 V_2O_5 层的两层结构。并且在全光谱照射下，通过对 RhB 溶液的光降解和 H_2O_2 生成来评价了纯相薄膜样品的光催化活性。沉积 30 min 的样品对 RhB 溶液的光催化降解速率是 RhB 溶液自降解速率的 2.55 倍。而且沉积 30 min 样品的 H_2O_2 生成速率为 6.38×10^{-3} mmol/min。

B01-O-14**二维半导体异质结的电子结构和光学性质研究与光催化性能调控**

李玲霞*

兰州理工大学

光催化制氢技术对于缓解能源危机与解决环保领域的问题具有重要意义。二维异质结材料通过全新的界面电荷转移机制有望解决高效光催化剂设计与发展中载流子分离效率低下的瓶颈问题。通过建立二维体系实现对新型高效光催化剂的设计并研究电子结构和光学性质以及界面工程对光电性质的调控。为此，以 GaSe 和 MoS_2 材料为切入点，分别构建 GaSe/ $MoSSe$ 和 Ga_2SSe/MoS_2 范德华异质结，构型表现出典型的 II 型能带排列，有利于实现电子空穴对在空间上的有效分离。静电势和 CDD 分别表明在界面域从 $MoSSe$ 到 GaSe 层和从 Ga_2SSe 到 MoS_2 层内置电场的产生，为光催化机理的研究供了理论依据。通过施加适当范围的应变实现复合体系带隙的有效调控，有望发挥光催化剂分解水的巨大应用潜力，以此揭示不同应变方式对异质结构特性和电子性能的影响。此外，通过较强的界面耦合作用诱导异质结体系具有良好的可见光响应能力和载流子迁移率。上述异质结光催化模型可从带边排布，载流子迁移率及光吸收谱方面提高体系的光催化性能，为新型光催化剂材料的理论设计提供一定的借鉴意义。

B01-I-14**氮化碳材料中孤对电子跃迁的晶格振动机制**

袁玉鹏*、江道传、胡少年、屈意

安徽大学

光催化材料可以直接将太阳能转换为高价值化学品，在诸多光催化材料中，石墨相氮化碳 (g-CN) 材料的光催化性能备受关注。针对氮化碳材料中存在孤对电子跃迁 ($n-\pi^*$) 物理机制不清、以及 $n-\pi^*$ 跃迁对

激发态电荷衰减动力学影响不明确等问题, 我们首次从晶格振动的角度, 从理论上证实 g-CN 中垂直于七嗪结构单元的振动模式, 会导致七嗪结构单元发生扭曲变形, 破坏其结构对称性, 使 $n-\pi^*$ 由跃迁禁阻变成跃迁允许, 拓展了 g-CN 材料的光吸收范围至近 600 nm; 在此基础上, 采用飞秒瞬态吸收光谱, 证实 $n-\pi^*$ 延长了浅捕获态光活性电子寿命, 提高了光催化产氢性能。上述研究厘清了 g-CN 材料中 $n-\pi^*$ 跃迁的物理机制及其对激发态电荷动力学的影响, 为利用 $n-\pi^*$ 跃迁提高 g-CN 材料光催化性能提供了理论和实验基础。

B01-I-15

BiVO₄ 光阳极设计制备及其性能研究

王泽岩*

山东大学

光电催化分解水技术是实现未来绿色产氢的具有潜力的新技术之一, 而高效光阳极是实现高效光电催化分解水的关键因素之一。BiVO₄ 因其具有良好的可见光吸收、优异的半导体性能和较高的理论太阳能转换效率收到人们的广泛关注。为进一步提高 BiVO₄ 光阳极的光电催化性能, 从促进载流子分离、结合新奇物理效应和耦合有机物氧化等方面, 开展了高效 BiVO₄ 光阳极设计、制备及其相关性能的研究, 提出了相变诱导、电子陷阱、应力调控等系列提升 BiVO₄ 光阳极性能的调控策略, 发现了有效释放有机物化学能构建高效光电化学燃料电池的新机制。为制备高效 BiVO₄ 光阳极, 进一步提高光电催化分解水产氢活性提供新的思路。

B01-I-16

光电催化废弃碳资源定向转化

储升*

东南大学

生物质、废塑料和二氧化碳是重要的废弃碳资源, 其转化和利用受到广泛的关注。但这些废弃碳资源的转化路径复杂, 选择性难以控制, 如何实现其高效定向转化制备高价值目标产物是一项巨大的挑战。与传统热催化过程相比, 光电催化剂吸收光能后可产生具有高氧化还原能力的光生电荷或活性物种, 在温和条件下即可实现废弃碳资源的高选择性转化。本次报告将介绍废弃碳资源光电催化转化的一些最新研究进展, 特别是催化材料的表面反应机制和目标产物的高选择性定向合成, 为废弃碳资源的高值化利用提供一种新的途径。

B01-I-17

宽带隙半导体材料纳米结构在新能源领域应用

王永杰*¹、高小武^{1,2}、赵紫薇^{1,2}、张寒松¹、代兵²、朱嘉琦²

1. 哈尔滨工业大学(深圳)

2. 哈尔滨工业大学

以氮化镓、金刚石为代表的宽带隙半导体材料在发光器件、轨道交通、生物医疗和新能源等领域拥有巨大市场和发展潜力。而材料的生长工艺和界面调控是制约其后续研究和推广应用的首要难题。报告首先介绍课题组在氮化镓材料分子束外延生长的研究进展, 主要讨论其低维纳米线/膜结构的生长、能带调控、界面工程以及在光催化制备新能源领域的研究工作。基于金刚石优异的稳定性和宽阔的能带调控潜力, 报告还介绍了课题组在金刚石材料 MPCVD 外延生长技术, 通过构建丰富的表面官能团调控表界面催化活性, 实现金刚石纳米结构在光催化碳还原等领域的应用技术。

B01-O-15

长效抗菌和环境净化 GaN:ZnO 光催化材料的构筑及其可见光杀菌活性研究

胡艳玲*

厦门理工学院

GaN:ZnO 是由 ZnO 与 GaN 形成的固溶体, 属于纤锌矿结构半导体材料。该材料具备较好的化学稳定

性、有可见光相应、禁带宽度可调节等特点，同时还表现出较长的光生载流子寿命，在光催化降解有机污染物和消灭微生物方面具有较大潜力。本研究针对 GaN:ZnO 固溶体粉末进行了表面化学处理和空气热处理，以试图获得高表面氧空位 (V_O) 密度、高晶体质量、高 ZnO 固溶浓度的 GaN:ZnO 固溶体粉末，并设计制备了 GaN:ZnO/MoO₃ 异质结，以增强其处理污染物和细菌能力。通过对该材料进行 XRD, SEM, STEM/EDS, XPS, EPR, Raman, FT-IR spectra, DRS, 和 Mott-Schottky (MS) 的表征，同时测试了该材料降解罗丹明 b 和杀菌实验。结果发现：经过后处理，GaN:ZnO 固溶体粉末表面形成了富含缺陷的 α -Ga₂O₃ 壳层，从而形成 GaN:ZnO@ α -Ga₂O₃ 核壳结构。 α -Ga₂O₃ 较低的价带位置使得固溶体粉末在光照后产生光生空穴而具有强氧化性；同时， α -Ga₂O₃ 表面的氧空位 (V_O) 和镓空位 (V_{Ga})，GaN:ZnO 的氧空位 (V_O)，以及负载的 MoO₃ 还具有储存光生电子和光生空穴的作用。因此，GaN:ZnO@ α -Ga₂O₃ 核壳结构不仅能在可见光光照条件下稳定工作，在暗态下也可以高效降解罗丹明 B、消杀大肠杆菌和金黄色葡萄球菌。通过 EPR 自由基捕获和淬灭实验，确定了 GaN:ZnO 固溶体粉末在可见光光照和暗态条件下均能产生羟基自由基 ($\cdot OH$)、超氧自由基 ($\cdot O_2^-$) 和单线态氧 (1O_2) 等活性氧物种 (ROS)。结合金属离子浸出实验，确定其灭菌效果是由 ROS 和 Zn²⁺ 和 Ga³⁺ 离子溶出效应协同实现。

B01-I-18

带电吸附剂的制备与应用

李怀光

香港中文大学 (深圳)

空气中直接捕集二氧化碳是实现碳中和的重要技术路径，采用碱性溶液 (例如氢氧化钾、氢氧化钙等) 作为吸附剂的碳捕集方法，具有吸附容量大、效率高和速度快等显著优势，但是吸附产物碳酸盐具有较大的晶格能，需要在 900 °C 的高温下进行二氧化碳脱附，大大增加了碳捕集的运行成本。如何降低捕集能耗是目前高性能吸附材料研发的关键。本研究出了一种创新方法，通过电化学技术分离带电离子作为吸附位点，成功设计开发了一类新型吸附剂材料，并将其命名为 “Charged sorbent (带电吸附剂)”。这种吸附材料利用类似电池的充电过程，在低成本活性碳的孔隙中，积聚大量活性氢氧根离子，并通过形成碳酸 (氢) 根的方式，迅速捕获空气中的二氧化碳。与传统的块状碳酸盐相比，带电吸附剂的脱附过程无需克服晶格能垒，因此能在相对低温 (90 - 100 °C) 下完成脱附。同时，由于吸附剂具备良好的导电导热性能，可以直接利用可再生能源进行原位焦耳加热脱附，极大的提高了能源利用效率。

[1]

B01-I-19

Charge Carriers Modulation Over Atomically Precise Metal Nanoclusters for Solar Energy Conversion

Fang-Xing Xiao*

Fuzhou University

Atomically precise metal nanoclusters (NCs) consisting of accurate number of metal atoms and stabilizing ligands have ignited massive interest due to their peculiar atomic stacking fashion, quantum confinement effect, and molecular-like energy band structures, which are wholly distinct from conventional metal nanocrystals (NYs).¹ Recent years have witnessed sporadic investigations on the metal NCs-based photosystems, but most of which are predominantly confined to TiO₂.²⁻⁴ The deficiency of metal NCs-involved photosystems is mainly attributed to the following integrated reasons including: (1) scarcity of metal NCs and semiconductors with applicable energy level alignment; (2) ultra-short carrier lifespan of metal NCs, which makes fine modulation of charge transfer inaccessible; (3) intrinsic light-induced instability of metal NCs, which ruins their advantageous photosensitization effect. To solve these problems, it is highly desirable to find ways to finely tune the charge transfer over metal NCs. To these ends, we comprehensively investigate the strategies of prolonging the charge lifetime of metal NCs and stabilizing metal NCs towards photoredox catalysis such as interface configuration engineering, charge transport pathway design, and heterostructure construction.⁵⁻⁷ These works provide new perspectives for rationally crafting metal NCs-based photosystems and reinforce our fundamental understanding

on photocatalytic and photoelectrochemical mechanisms of atomically precise metal NCs for solar energy conversion.

B01-I-20

光驱动甲烷催化转化制高值化学品

宋辉*

天津大学

针对光催化甲烷转化所面临的活性差和选择性低的问题，我们开发了负载纳米金属助催化剂的 ZnO 和 TiO₂ 光催化剂，并采用水相介质和对甲烷加压的反应条件，首次用氧气以高反应量子效率以及高选择性 (>90%) 将甲烷直接氧化为甲醇等 C1 含氧化合物。CH₄ 和 O₂ 分别被光激发产生的空穴和电子氧化还原为 $\cdot\text{CH}_3$ 和 $\cdot\text{OOH}$ ，这两者结合并经过一系列反应最终生成甲醇和甲醛，避免了过度氧化的发生。此外，我们设计了负载 Au 纳米颗粒的 ZnO/TiO₂ 复合光催化剂，其在气固相流动反应器中利用氧气将甲烷高效、高选择性 (>90%) 地光氧化偶联生成乙烷。通过构建 ZnO/TiO₂ 异质结构并调控其组分和表界面，促进了光生电子和空穴的分离。同时 Au 助催化剂增强 O₂ 活化和促进甲基物种的脱附，其在气相中形成 $\cdot\text{CH}_3$ ，并进一步偶合生成 C₂H₆，避免了 CH₄ 的过度氧化成 CO₂。

B01-I-21

面内极化铁电材料中带电畴壁对光催化性能的影响

管杰*

东南大学

铁电材料具有天然的可翻转内建电场，可以促进其内部电子空穴对的分离以及实现表面功函数的调控，因此在光催化过程中有着重要的应用价值。近年来，多种二维面外极化铁电材料被证明在相关催化反应中有着其独特的优势，而面内极化材料却不曾得到关注。我们通过第一性原理计算，以二维 GeS 材料为例，预测了其面内极化铁电畴与带电畴壁的存在。带电畴壁使得材料内部各个铁电畴内产生独立的内建电场并在畴壁处表现出不同的功函数，促进其在不同的畴壁附近分别发生氧化和还原反应。此外，相较于完美晶格，畴壁处的电荷聚集与结构畸变改变了其附近对不同基团的吸附性质，可以降低水分解反应过程中的中间体的势垒从而达到提高反应效率的作用。

B01-O-16

紫磷及紫磷烯的光催化应用

张锦英*、赵雪雯、谷梦玥、翟锐、成永红

西安交通大学

宏观紫磷单晶及其准确晶体结构在 2020 年由本课题组成功获得，并成功剥离出紫磷烯。发现紫磷烯层内的原子键构成使其具有优异的光特性，其能带分布符合光催化产氢、二氧化碳还原及固氮反应的要求。简单分散的紫磷纳米片在 1%Ag 助催化剂辅助下的光催化产氢速率达到 675 $\mu\text{mol}/\text{h}\cdot\text{g}$ ，是黑磷烯的数倍，紫磷中部分磷原子 P9 和 P21 被锑原子替代后形成 P76Sb3.27 的锑掺杂紫磷进行能带调控，使其催化产氢速率提高到 1473 $\mu\text{mol}/\text{h}\cdot\text{g}$ ，在此基础上进一步通过等离子体作用引入磷空位使其光催化产氢效率提高到 5216 $\mu\text{mol}/\text{h}\cdot\text{g}$ ，高过大部分金属催化剂，且在连续工作 16h 后无减弱现象，具有极高的稳定性，并通过超快光谱分析其载流子迁移路径，揭示其光催化产氢机理，进而通过制备紫磷量子点，紫磷异质结等复合结构提高其光催化产氢性能。同时发现紫磷烯具有优异的光催化还原二氧化碳性能，且具有高的选择性，能将二氧化碳选择性还原成具有高附加值的乙烯产物，并揭示其光催化路径，在高的选择性下其乙烯产率达到 10.34 $\mu\text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$ ，优于现有报导的大部分催化剂。同时发现紫磷烯在光照下可以将氮气转化为氨实现固氮作用。并初步发现紫磷及紫磷烯在柔性光伏、医学杀菌抗癌、光电检测等领域都具有优异的特性，课题组正在进一步挖掘紫磷和紫磷烯的潜在应用。

B01-O-17

构建高效电荷分离的纳微结构光催化剂及应用

杨凯*

江西理工大学

光催化还原 CO₂ 的太阳能化学转化是解决 CO₂ 污染的重要途径。决定因素是利用高效光催化剂来实现这一转化过程。由于能带结构的不匹配, 在传统的 p 型半导体 NiO 上无法将 CO₂ 光还原为 CO。我们采用熔融盐法(MSM)合成了高分散铒(Er)原子(nEr/NiO_{1-x})掺杂的 n 型 NiO, 以加速电荷分离和转移(CSR)。值得注意的是, 2Er/NiO_{1-x} 表现出最高的 CO₂ 光还原性能, CO 产率为 368 μmol·g⁻¹·h⁻¹(选择性 95.4%)。铒原子的掺杂使 NiO 晶格发生扭曲, 并调节内建电场以增强 CSR。同时, 高分散 Er 原子的修饰通过增加氧空位的数量来拓宽光吸收, 促进 CO₂ 的吸附和活化。理论计算证实, 反应的能垒可以显著降低, 而生成的 CO 更有可能被解吸, H₂ 的生成被抑制。获得的 n 型 nEr/NiO_{1-x} 高效光催化剂为 CO₂ 光还原打开了窗口。

B01-I-22

2D COFs 光催化产氢材料的表界面调控

李鑫*、沈荣晨、郝磊、黄灿

华南农业大学

2D 共价有机框架(2D COFs)具有明确且有序结构、容易修饰等特点, 在光催化产氢领域中展现出了很好的应用前景。但 2D COFs 存在较大的激子解离难、活性中心不足及载流子复合快等动力学瓶颈^[1]。为解决上述关键科学问题, 需要对 COFs 半导体进行表界面改性。本报告从局域微环境调控(包括位置异构、异原子掺杂和表面基团修饰)^[2-6]、活性中心精准调控(包括超薄 2D 纳米片开发、单分子结创建及新型拓扑结构构建)^[7-9]以及异质界面调控(2D 层状 Z/S 型异质结构构建)^[3,10-13]等三个角度介绍本课题组主要进展。同时, 通过多种手段(载流子动力学分析、飞秒瞬态吸收光谱表征, 激子结合能分析、理论计算、瞬态表面光电压及瞬态荧光测试等)系统深入地研究了体系的载流子传输分离机制及光催化产氢机理。这些研究为改善 COFs 的载流子及激子分离提供可参考的解决方法, 也为 COFs 在其它光催化体系的推广应用提供参考。

参考文献

- [1] Liang, Z.; Shen, R.; Ng, Y. H., et al. Chem Catalysis 2022, 2, 2157.
- [2] Shen, R.; Li, X.; Qin, C., et al. Adv. Energy Mater. 2023, 13, 2203695.
- [3] Shen, R.; Li, N.; Qin, C., et al. Adv. Funct. Mater. 2023, 33, 2301463.
- [4] Hao, L.; Shen, R.; Liang, G., et al. Appl. Catal. B-Environ. Energy 2024, 348, 123837.
- [5] Hao, L.; Shen, R.; Huang, C., et al. Appl. Catal. B-Environ. 2023, 330, 122581.
- [6] He, H.; Shen, R.; Zhang, P., et al. J. Mater. Chem. A 2024, 12, 227.
- [7] Huang, K.; Bai, J.; Shen, R., et al. Adv. Funct. Mater. 2023, 33, 2307300.
- [8] Shen, R.; Qin, C.; Hao, L., et al. Adv. Mater. 2023, 35, 2305397.
- [9] Bai, J.; Shen, R.; Liang, G., et al. Chin. J. Catal. 2024, 10.1016/S1872.
- [10] Ding, H.; Shen, R.; Huang, K., et al. Adv. Funct. Mater. 2024, 34, 2400065.
- [11] Shen, R.; Liang, G.; Hao, L., et al. Adv. Mater. 2023, 35, 2303649.
- [12] Liang, Z.; Shen, R.; Zhang, P., et al. Chin. J. Catal. 2022, 43, 2581.
- [13] Gao, R.; Bai, J.; Shen, R., et al. J. Mater. Sci. Technol. 2023, 137, 223.

B01-I-23

抗生素污染均/多相光催化治理策略及纯水中光催化产双氧水研究

陈智*

中国计量大学

近年来, 抗生素污染问题日益凸出, 对生态环境的影响日趋严重, 是受到人们的广泛关注一类新型污染物, 亟需对其开展有效治理, 以实现生态环境保护 and 可持续发展。半导体光催化剂技术以太阳光为驱动, 是实现水中抗生素污染物高效治理的一个有效途径, 而高效光催化剂的开发是半导体光催化技术的核心。

本文总结了近年水中抗生素污染物光催化治理所取得进展, 提出了光催化降解抗生素污染物的改性策略。首先, 开发了易溶于水的一维氰尿酸钾 $K_3[C_6N_7O_3]$ 棒状粉体, 并成功应用于水中抗生素污染物高效均相光催化去除, 以及乙醇中抗生素的高效多相光催化去除。其次, 开发了一系列新型异质结光催化剂材料, 并应用于水中抗生素污染物的多相光催化高效去除, 深入研究了其界面作用机制以及反应机理。进一步开发了新型光催化剂材料, 并应用于无牺牲试剂的纯水光催化产双氧水。此外, 揭示了光催化技术在环境污染治理领域的独特作用, 必将有助于抗生素等新型污染物的高效环境污染治理以及双氧水的高效生产。

B01-I-24

基于无铅钙钛矿与反钙钛矿的高效光催化体系构筑

黄瀚林*

福州大学

传统的铅基钙钛矿受限于铅元素严重的毒性以及材料的不稳定性, 未取得广泛的发展与应用。因此, 设计与合成无铅卤化物钙钛矿衍生物对于发展绿色、稳定和高效的光催化体系至关重要。报告人通过异质结构建以及组分调控等策略, 展示了无铅钙钛矿衍生物在光催化有机物小分子碳-氢键选择性氧化以及大分子塑料选择性降解转化领域的高效性能。与此同时, 报告人近年来还重点关注一类新型的钙钛矿结构衍生物: 反钙钛矿型氮化物, 基于该类材料阴阳离子类型在钙钛矿型晶格位点交换后获得的丰富的表面金属位点和良好的导电性, 探究了其作为产氢及二氧化碳还原助催化剂的应用潜力。

(1) 通过原位生长法构筑了铋基钙钛矿和金属硫化物的新型异质结, 实现了高活性的光催化芳香烃选择性氧化, 并首次探究了卤化物钙钛矿表面位点的协同活化作用;

(2) 通过调控铋/锑金属离子的元素组成, 设计与合成掺杂型无铅钙钛矿光催化剂, 实现了高效的光催化环己烷氧化, 高选择性生成环己醇/环己酮产物;

(3) 首次实现了基于卤化物钙钛矿光催化剂的聚苯乙烯高效选择性转化生成苯甲酸, 将卤化物钙钛矿的光催化反应底物从小分子拓展至大分子领域;

(4) 首次利用二元铜/锑基钙钛矿作为全光谱吸收和高转换效率的光热材料, 实现了光热驱动的固态氮硼烷快速脱氢;

(5) 首次将反钙钛矿氮化物作为光催化反应体系的产氢和二氧化碳还原的助催化剂, 实现了多种紫外光或可见光响应的半导体光催化制氢性能的大幅度提高; 以及利用分子型光敏剂, 将二氧化碳高选择性还原制备一氧化碳。

B01-I-25

基于离子交换技术原位调控光催化剂材料

侯慧林*

宁波工程学院

半导体光催化技术作为一种将太阳能俘获、转换和存储于一体的绿色技术, 在无机光化学研究领域被誉为“圣杯”, 展示出极具吸引力的应用前景。研究表明, 要实现更卓越的光催化性能, 使用高效稳定的光催化剂是至关重要的先决条件。然而, 实际半导体光催化剂材料在效率与稳定性方面常常面临着巨大挑战, 主要受以下三个方面的缺陷限制: 自身吸光能力差, 导致太阳能利用率偏低; 自身电导率低, 电荷在其内部传导距离短, 从而加剧光生电子-空穴复合概率, 造成光生载流子的严重复合损失; 表面反应速率缓慢, 降低了表面空穴的利用率以及光催化剂的稳定性。因此, 解决这三个问题成为当前半导体光催化剂材料研发领域迫切需要解决的技术瓶颈。基于这一挑战, 本文提出采用离子原位交换策略, 对典型半导体光催化剂表面进行原子级别的精确调控, 旨在拓展其光响应范围、增强载流子分离效率, 以及提升水氧化性能, 推动高效、高稳定半导体光催化剂材料的研发。

参考文献

[1] Hou, H, Chris R. Bowen, CR; Yang, D; Yang, W, Chem, 2024, 10(3), 800-831.

[2] Hou, H.; Shao, G.; Yang, W.; Wong, W-Y. Prog. Mater. Sci., 2020, 113: 100671.

[3] Hou, H.; Wang, L.; Gao, F.; Wei, G., Tang, B.; Yang, W.; Wu, T., J. Am. Chem. Soc., 2014, 136: 16716.

[4] Hou, H.; Zeng, X.; Zhang, X. *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2020, 59: 17356.

[5] Song, K.; Hou, H.; Zhang, D.; He, F.; and Yang, W., *Appl. Catal. B-Eviromen.*, 2023, 330: 122630

[6] Song, K.; He, F.; Zhou, E.; Wang, L.; Hou, H.; Yang .W. *J. Energy Chem.*, 2022, 68: 49.

B01-O-18

二维铋基半导体光催化材料的开发与设计

崔丹丹*

北京航空航天大学

随着我国社会经济的快速发展，能源和环境问题越来越受到人们的广泛关注。而太阳能是唯一能够在总量上替代化石资源的可再生能源，因此，开发和利用太阳能具有重要的意义。为了有效的将太阳能转化为太阳能燃料，对高效光催化剂的开发有着极高的要求。近年来，铋基半导体由于其独特的电子和结构性质，满足了有效和高效光催化性能的基本要求，引起了人们的广泛关注。在本报告中，作者将从缺陷工程和异质结构建两个方面介绍铋基半导体光催化材料的开发和设计相关研究。同时提出对铋基和其他 p-区半导体光催化剂的开发和设计的想法，为设计和探索具有高活性新型光催化剂提供新的思路。

B01-O-19

阳离子交换法制备铜掺杂 CdS 及其光催化制氢研究

薛明珠、董煜琛、叶校源、关祥久*、郭烈锦

西安交通大学

半导体光催化分解水技术是实现太阳能零碳转化和高效制氢的绿色途径。其中，开发具有合适带隙和可调结构等优势的金属硫化物材料实现光催化分解水制氢是近年来的研究热点。本文针对 CdS 材料用于光催化制氢涉及的关键问题，利用简单的阳离子交换策略成功合成了高度分散、大小均一的铜掺杂 CdS 纳米颗粒，实现了能带结构、载流子分离和表面反应的同步调控。铜离子的引入有效减小了带隙，从而拓展了光吸收范围，并促进光生载流子快速分离；理论研究进一步证实了铜掺杂降低了氢吸附自由能，并形成新的高效活性位点。因此，优化了 CdS 的光催化制氢活性。在可见光 ($\lambda \geq 420 \text{ nm}$) 照射下，Cu 掺杂 CdS 纳米颗粒的产氢速率为 $2459.3 \mu\text{mol}\cdot\text{h}^{-1}\text{g}^{-1}$ ，约为纯 CdS 的 11 倍。本工作为设计制备新型光催化制氢材料体系开发提供了新的策略。

B01-O-20

利用机器学习预测新型二维材料及其对小分子吸附、检测和光催化等的应用

汪敏*、蔡兴红、童瑶

西南大学

利用机器学习的方法预测若干种新型二维纳米材料（如 hP-C18, net-C18, AIP₅, AlO₂ 等），并利用二维材料的比表面大、易于吸附分子、表面活性强等特性，从理论上研究和预测这类新型材料在有毒气体分子、挥发性有机化合物、重金属等的吸附、检测、降解等情况，研究其用于光/电催化的潜在可能性。

1) hP-C18 是一种间接带隙半导体的全碳的二维材料，具有很强的硬度。

2) net-C18 是一种类石墨烯的全碳的二维材料，具有金属性，预测其可用于锂电池的负极材料。

3) AIP₅ 是一种准直接带隙半导体，间接/直接带隙为 0.92/0.95 eV；这种材料具有很好的吸附 As、Hg、Cd 并且有不同的电子性能响应，从而预测可以检测这些重金属。

4) AlO₂ 是一种具有负泊松比的金属性二维材料，预测其可用于吸附和检测具有毒性的挥发性有机化合物（CH₂O, C₂H₃Cl and C₆H₆）。

B01-O-21

基于 2D 光催化抗菌材料的设计

饶绍盛¹、孙中体¹、刘芹芹¹、杨娟*¹、朱永法²

1. 江苏大学

2. 清华大学

世界上约 30%的人口仍然无法获得安全饮用水，每年有 200 万人死于水传播疾病。与传统的水消毒方法（如臭氧、卤化物剂和紫外线辐射）相比，基于太阳能的光催化是一种绿色消毒技术，已显示出通过产生高温和活性氧自由基（ROS）对抗耐药细菌的潜力。本汇报将探讨基于二维（2D）材料设计的光催化抗菌技术，重点介绍这些材料在高效光催化和光热杀菌方面的优势。总结了课题组近两年来的研究成果，详细介绍了基于二维（2D）材料设计策略，包括通过构建异质结构和单原子的沉积来优化光催化抗菌性能。主要关注这些策略如何提升光生电子和空穴的分离效率、降低反应能垒、以及形成强内置电场，并结合光热效应，显著提高材料的抗菌效率。这些新型 2D 光催化材料不仅能够模拟太阳光下实现高效灭菌，还在实际水处理应用中表现出优异的杀菌效果，为解决环境中的细菌污染问题提供了创新性的解决方案。

B01-I-26

MOFs 光催化材料在有机合成中的应用研究

刘媛媛

山东大学

金属有机框架材料（MOFs）是一类由有机配体和金属节点组成的具有周期性结构的多孔材料，在气体分离、药载、催化等领域具有广泛的应用。MOFs 是连接异相催化和均相催化的桥梁，具有结构明确、活性位点均一的特点，MOFs 还具有可裁剪性，催化活性位点的种类、活性位点之间的距离可调。重要的是，MOFs 具有半导体的性质，在光照下可产生自由的电子空穴对，实现光照下有机物降解、分解水产氢、二氧化碳还原、选择性有机合成等。我们课题组在 MOFs 光催化有机合成中做了系列工作，具体如下：

发现非晶铁基 MOF（FePPA）中的长程无序结构，促进了光生载流子分离，进而促进超氧自由基的产生，在甲苯选择性氧化到苯甲醛的反应中，表现出良好的活性和选择性^[1]。发现氢键作用，可进一步稳定 π -d 共轭结构的二维 MOFs，使之在 1.5V (vs RHE) 偏压下，2000 个小时电流没有明显的下降^[2]。

采用铋（Bi）卟啉的 MOFs（Bi-PCN-224）为光催化剂，发现 6 小时内，CO₂ 和环氧丙烷加成反应的效率达到 100%。对比试验表明，在没有可见光照射下，反应效率只有 36%，说明光照对提高反应效率具有重要的作用。在没有 Bi 的条件下，即使在光照下，反应效率也很低，只有 31%，说明铋对该反应也具有重要的作用^[3]。在 UiO-67 中，引入硼原子，实现了环氧烷的化学吸附，提高了与二氧化碳环加成的反应速率^[4]。通过后修饰法在 UiO-bpydc 上分别引入 Zn 和 Ce，发现 Zn 的引入可促进配体-金属间的电荷转移（LMCT），进而促进环氧烷的活化，最终提高了反应效率^[5]。在上述结果的基础上，发现材料的光热效应协同光催化，可进一步提高反应活性^[6]。我们进一步对环加成反应进行了放大实验，目前可达到每小时克级产率。

参考文献

- [1] H. G. Zhang, B. B. Huang, Y. Y. Liu, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, e202400965.
- [2] L. T. Lin, B. B. Huang, Y. Y. Liu, et al., *Adv. Mater.*, 2024, 2402388.
- [3] G. Y. Zhai, Y. Y. Liu, B. B. Huang, et al., *ACS Catal.*, 2021, 11, 1988–1994.
- [4] Y. J. Li, Y. Y. Liu, B. B. Huang, et al., *Chem. Eng. J.*, 2022, 437, 135363
- [5] G. Y. Zhai, Y. Y. Liu, B. B. Huang, et al., *Appl. Cataly. B: Environ.*, 2022, 301, 120793.
- [6] H. G. Zhang, Y. Y. Liu, B. B. Huang, et al., *Appl. Cataly. B: Environ.*, 337 (2023) 122909.

B01-I-27

类石墨烯聚合物框架材料：动态化学策略制备及光催化活性

张帆*

上海交通大学

有机框架材料（COFs）是一种新兴功能材料，兼具了传统高分子材料和多孔材料（如分子筛，多孔碳）的优异属性，拥有高度的可设计性、精确可调的微/纳孔道、高比表面积、轻质富碳骨架，以及可在多

尺度/层级上进行组装及图案化编辑等特点。传统 COFs 材料以可逆动态共价键（如，硼酸酯键，亚胺键等）连接而成，稳定性和电子离域性弱，严重影响了低维结构相关的物性和活性，也不利于加工等操作，阻碍了这类高晶态聚合物的应用性拓展。2016 年，本课题组以 Knoevenagel 缩合反应，溶液法制备了首例结晶性全 sp²-碳连二维聚合物框架材料，也被认为是类石墨烯聚合结构。继而，通开发聚合单体和优化聚合反应条件，获得了从中性到离子性骨架，从均孔到异孔拓扑结构等特征的多个系列亚乙烯桥连 COFs，初步揭示了此类高度有序结构源于碳碳双键形成反应的热力学控制属性，为建立和完善碳碳键动态共价化学提供了有力支撑。这里，将介绍本课题组在相关方面最新进展，特别是通过多齿单体设计，构筑新型类石墨烯框架材料，并精准调控其拓扑结构和图案化电子布居，进而，实现其空间限域选择性光催化有机转化。

B01-I-28

光催化记忆效应：从环境治理到材料物性时效调控

李琦

西南交通大学

报告人的前期系列研究工作表明，通过适当的材料设计，光催化材料可以在光照条件下存储光生载流子，在光照关闭后能够通过所存储光生载流子的持续释放来产生活性基团，从而产生光催化记忆效应，使其能在无光条件下较长时间保持反应活性，解决了常规光催化材料在光照关闭后失去活性的难题，大大增强光催化技术对环境污染的处理效果，降低处理成本和能耗，使光催化技术在更广泛的环境治理领域获得新的应用。报告人近期发现，光催化记忆效应可以通过影响材料内部的电子结构，从而实现对功能材料的结构、光、电、磁等物性的时效调控，进而影响其功能。在此次报告中，报告人将简述光催化记忆效应的原理与其在环境治理中的应用，并着重介绍通过光催化记忆效应获得的新型光致伸缩效应、超级电容器光辅助充电、光致变色以及极性光催化材料光压电协同响应等方面的研究进展。报告人认为，这可能成为光催化在现有能源、环保领域应用之外的新方向。

参考文献：

1. **Qi Li**, Yin Wai Li, Pinggui Wu, Rongcai Xie, and Jian Ku Shang, "Palladium Oxide Nanoparticles on Nitrogen-Doped Titanium Oxide: Accelerated Photocatalytic Disinfection and Post-Illumination Catalytic 'Memory'", *Advanced Materials*, 20 (19) 3717-3723 (2008).
2. **Qi Li**, Yin Wai Li, Zhiquan Liu, Rongcai Xie, and Jian Ku Shang, "Memory Antibacterial Effect from Photoelectron Transfer between Nanoparticles and Visible Light Photocatalyst", *Journal of Materials Chemistry*, 20 (6) 1068-1072 (2010).
3. Lingmei Liu, Weiyi Yang, **Qi Li**,* Shian Gao, and Jian Ku Shang, "The Synthesis of Cu₂O Nano-spheres Decorated with TiO₂ Nano-islands, their Enhanced Photoactivity and Stability under Visible Light Illumination, and their Post-illumination Catalytic 'Memory'", *ACS Applied Materials & Interfaces*, 6 (8) 5629-5639 (2014).
4. Lingmei Liu, Wuzhu Sun, Weiyi Yang, **Qi Li**,* and Jian Ku Shang, "Post-illumination Activity of SnO₂ Nanoparticle-decorated Cu₂O Nanocubes by H₂O₂ Production in Dark from Photocatalytic 'memory'", *Scientific Reports*, 6, 20878 (2016).
5. Fan Feng, Weiyi Yang, Shuang Gao, Caixia Sun, **Qi Li**,* "Post-illumination Activity in a Single Phase Photocatalyst of Mo-doped TiO₂ Nanotube Array from Its Photocatalytic 'Memory'", *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 6 (5), 6166-6174 (2018).
6. Fan Feng, Weiyi Yang, Shuang Gao, Linggang Zhu, and **Qi Li**,* "Photoinduced Reversible Lattice Expansion in W-doped TiO₂ through The Change of Its Electronic Structure", *Applied Physics Letters*, 112 (6), 061904 (2018).
7. Weiyi Yang, Yan Chen, Shuang Gao, Licheng Sang, Ruoge Tao, Caixia Sun, Jian Ku Shang, and **Qi Li**,* "Post-illumination Activity of Bi₂WO₆ in the Dark From the Photocatalytic 'Memory' Effect", *Journal of Advanced Ceramics*, 10 (2), 355-367 (2021).
8. Huiqin Ma, Weiyi Yang, Shuang Gao, Zifeng Lin, Zheyang Mo, Chao Li, Jian Ku Shang, and **Qi Li**,* "Photoirradiation-induced Capacitance Enhancement in the h-WO₃/Bi₂WO₆ Submicron Rod Heterostructure under Simulated Solar Illumination and its Post-illumination Capacitance Enhancement Retainment from Photocatalytic Memory Effect", *ACS Applied Materials & Interfaces*, 13 (48), 57214-57229 (2021).
9. Weiyi Yang, Jian Wang, Shuang Gao, Haoyu Zhang, Hongyang Wang, and **Qi Li**,* "Photo-assisted Charging of Carbon Fiber Paper-supported CeO₂/MnO₂ Heterojunction and Its Long-lasting Capacitance Enhancement in

Dark”, *Journal of Advanced Ceramics*, 11 (11), 1735-1750 (2022).

10. Lizhen Lu, Haoyu Zhang, Zhe Sun, Jinghui Wang, Haolin Wang, Jinbo Xue, Qianqian Shen, and **Qi Li***, “Creation of Robust Oxygen Vacancies in 2D Ultrathin BiOBr Nanosheets by Irradiation through Photocatalytic Memory Effect for Enhanced CO₂ Reduction”, *Chemical Engineering Journal*, 477, 146892 (2023).

11. Lizhen Lu, Haoyu Zhang, Jinghui Wang, Haolin Wang, Qian Chen, Jinbo Xue, Qianqian Shen, Chunliang Zhou, Jian Ku Shang, and **Qi Li***, “Long-lasting, Fast-switchable Photochromism in Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ Induced by Photocatalytic Memory Effect, and Its Subsequently Enhanced Piezoelectric Response and Catalytic Performances”, *Applied Catalysis B: Environment and Energy*, in press (2024).

B01-I-29

纳米光催化材料在抗感染皮肤治疗方面的研究

于欣*

济南大学

目前每年有数百万人受到细菌感染的困扰，由于抗生素的滥用，出现了“超级细菌”，根据世卫组织预测，到 2050 年，“超级细菌”将导致 1000 万人死亡，超过癌症。与普通抗生素相比，光催化抗菌方法具有以下两个优点：1) 对革兰氏阳性菌和革兰氏阴性菌普遍具有杀灭作用；2) 具有极高的稳定性从而对细菌的预防具有持久的作用效果。最重要的是，太阳光是最丰富的可再生能源，可以用作光催化系统的光源，并且光催化杀菌技术不会诱导细菌产生耐药性。光催化杀菌机理为：在光照射下，光催化剂会产生电子空穴对，电子与空穴会与表面的物质（H₂O 和 O₂ 等）结合产生活性氧自由基（ROS），可以有效的杀灭病原体。

虽然光催化抗菌有很好的疗效，但是在体内抗菌治疗时，光催化需要持续敞开光照（起作用的光生载流子在特定波长光照下才生成）；而伤口必须包扎（医疗常识—人类发现伤口感染原理并发明伤口包扎技术挽救了许多性命），而光照与包扎矛盾难调和。目前虽然可以利用可见光增加其穿透深度进行光催化杀菌，但其效果一直不是很理想。而且，光催化过程中产生的 ROS 寿命极短（皮秒或微妙），扩散半径有限，使其无法作用到细菌表面就会消失，也降低了杀菌效果。

针对光催化材料在杀菌治疗中可见光效果差，材料对细菌的捕获能力不足及需要持续光照的问题，申请人专注于将光催化材料应用到杀菌治疗中。首先，通过光催化机理研究，实现了近红外光响应的具有增强载流子分离能力的光催化性能；接着，通过纳米-生物界面的调控，实现了材料对细菌的捕获，使产生的 ROS 能够迅速的作用到捕获细菌的表面，增强了杀菌能力；进一步，将光催化与酶催化结合起来，解决了杀菌需要持续光照的问题，实现了“白”加“黑”的治疗，为实际应用的推进提供了理论依据和技术支持。

B01-O-22

单原子增强压电协同光催化性能研究及多物理场协同机制探索

周卢玉、谢泉、田军龙*

贵州大学

有机染料、抗生素在工业和生物医疗的发展中起到至关重要的作用，但因其产生的有机废水处理问题也成为了一个挑战。多物理场协同光催化将太阳光直接转化为化学能是当前环境修复的焦点，其中光催化材料活性位点不足、高光生电子-空穴复合严重制约了当前光催化技术的应用推广。本研究利用单原子掺杂技术结合铁电光催化材料压电效应优势，成功实现了光催化/压电协同光催化，同时解决了光催化材料活性位点不足和高光生电子-空穴复合这两大关键瓶颈。最终在 10 分钟内实现 RhB 的完全去除，30 分钟内对 TC 和 CIP 的去除率也分别达到了 91% 和 70%。本研究为多物理场效应协同光催化降解应用于环境修复提供指导。

B01-I-30

二维纳米复合光催化剂的设计与产氢性能

韩鑫*

华东理工大学

在“双碳”目标下，发展清洁的光催化分解水技术生产清洁的氢气具有重要意义。目前光解水产氢领域研究的热门材料之一是具有二维纳米结构的 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 。但是， $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 光生电子与空穴易复合，限制了其光催化分解水产氢性能的提高，通常需要构筑异质结以及添加助催化剂等来改善其光生载流子的转移效率并为其提供高活性的产氢位点。因此，通过合理的结构设计来构筑性能优异的二维 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 基光催化剂尤为重要。

在这里，主要介绍我们针对二维纳米 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 光催化剂的结构特点，开发的一系列二维 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 基光催化材料，如以新型 MXene 材料为前驱体制备得到的性能优异的碳掺杂 $\text{TiO}_2/g\text{-C}_3\text{N}_4$ 异质结光催化剂；二维助催化剂（RuNi 合金、金属烯、单原子改性 MoS_2 等）负载的 2D/2D $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 基高活性光催化剂。基于以上研究，我们发现针对二维光催化剂的结构特点，开发能与其结构匹配的二维助催化剂来提升其性能是一种更为高效的方法。

参考文献：

1. Qian An, Xin Han, Liu Jichang, et al. Applied Surface Science 2023, 618, 156597
2. Han Xin, Liu Qiaona, Liu Jichang, et al. ACS Appl. Mater. Interfaces 2023, 15, 26670-26681
3. Han Xin, Zhang Qinghong; Liu Jichang, et al. Chem. Eng. J. 2021, 426: 130824.
4. Han Xin, Zhang Qinghong, Wang Hongzhi, et al. Appl. Catal. B. 2020, 265: 118539.
5. Han Xin, Zhang Qinghong, Wang Hongzhi, et al. Appl. Catal. B. 2019, 243: 136-144.

B01-I-31

结晶氮化碳可见光及近红外光活性的调控策略

张国强*

大湾区大学(筹)

传统氮化碳面临着不完全聚合的问题，导致其无定型结构，严重阻碍了聚合物平面上光生载流子的转移。此外，特定的能带结构决定了其太阳光利用范围仅到 460 nm 和不到 10% 的太阳能量，严重制约了在能源光催化领域的应用。针对结晶度低、缓慢的电荷分离以及光吸收范围窄的问题，我们提出了结晶氮化碳的梯度掺杂^[1]、面内缝补和层间裁剪^[2]和激子解离^[3-4]等策略来加速电荷分离，通过缺陷修复^[5]、n 型掺杂^[6]和氧掺杂^[7]策略来扩展光吸收，最终实现了结晶氮化碳可见光及近红外光活性的调控。

参考文献

- [1] G. Zhang, Y. Xu, D. Yan et al., ACS Catal., 2021, 11: 6995-7005.
- [2] G. Zhang, J. Zhu, Y. Xu et al., ACS Catal., 2022, 12: 4648-4658.
- [3] G. Zhang, Y. Xu, J. Zhu et al., Appl. Catal. B-Environ., 2023, 338: 123049.
- [4] G. Zhang, Y. Xu, P. Zhang et al., Adv. Funct. Mater., 2024, 2315116.
- [5] G. Zhang, W. Huang, Y. Xu et al., Adv. Funct. Mater., 2023, 33: 2305935.
- [6] G. Zhang, Y. Xu, M. Rauf et al., Adv. Sci., 2022, 9: 2201677.
- [7] G. Zhang, Y. Xu, C. He et al., Appl. Catal. B-Environ., 2021, 283: 119636.

B01-O-23

择优取向光电催化薄膜的设计与制备

黄辉庭、冯建勇、李朝升*、邹志刚

南京大学

太阳能驱动的光电催化分解水制氢利用半导体电极吸收太阳光直接将水分解成氢气和氧气，是一种有潜力的大规模绿氢制取技术。如何高效将光生载流子转化成所需的能源小分子是该领域亟待攻克的基础前沿难题。增强光电催化薄膜的电荷传输能力可有效提高表面可资利用的光生载流子数量。光电催化材料往往具有较低的晶体对称性，表现出各向异性的物理化学性质。外延单晶薄膜是获得特定晶面或晶向上理化性质最有效的方法，但其制备工艺复杂，成本高昂。对于多晶薄膜，若使材料的晶粒取向在衬底上集中分布在某一晶向附近，亦即形成择优取向薄膜，该薄膜材料将在特定晶向上获得接近单晶的性质，进而可最

大化利用其各向异性的物化性质。例如，赤铁矿氧化铁是典型的光催化材料，其(001)基面的面内电导率是面间电导率的一万倍，要使光生载流子在电极薄膜内的传输损失最小，该基面须垂直于衬底。我们在不同透明导电衬底上获得了不同取向分布的氧化铁薄膜，在氟掺杂氧化锡(FTO)衬底上形成<110>择优取向的氧化铁薄膜，铟锡固溶体(ITO)上得到的是随机取向的薄膜。<110>择优取向的氧化铁薄膜表明其中氧化铁晶粒的(001)基面垂直于衬底。通过分析由不同晶体结构的材料（六方相氧化铁和四方相氧化锡）组成的异质界面，我们发现两者通过共用氧原子形成共格界面，具有相似的氧亚晶格，并提出了一种量化材料亚晶格相似性的方法，为拓展择优取向薄膜体系提供参考。基于原子力显微镜的电学测量表明择优取向的薄膜比随机取向薄膜可产生更高的光电压，证明择优取向薄膜有利于光生载流子传输。

B01-O-24

梯形 p-n 结 $\text{Na}_{0.6}\text{CoO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ 异质结构绿色制氢高效光催化剂的制备、表征及机理

吴艳*

中国地质大学（武汉）

了解光生电荷在纳米尺度界面上的空间分离和传输过程对于理解异质结构光催化剂上的催化反应机制至关重要。在这里，我们通过静电自组装技术开发了一种 p-n 结 $\text{Na}_{0.6}\text{CoO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ 梯形光催化剂。显著制氢率在最佳的 NCO-20/CN 上获得了 $0.294 \text{ mmol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$ ，比纯 $\text{g-C}_3\text{N}_4$ 高出 10 倍。原位 XPS 显示， $\text{Na}_{0.6}\text{CoO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ 中的电子在没有和有光照的情况下具有不同的流动方向，表明通过 $\text{Na}_{0.6}\text{CoO}_2$ 和 $\text{g-C}_3\text{N}_4$ 相互作用形成了内置电场。DFT 计算和紫外光电子能谱验证了 $\text{g-C}_3\text{N}_4$ 和 $\text{Na}_{0.6}\text{CoO}_2$ 具有符合梯形异质结构的能带结构。原位 Kelvin 探针显微镜研究表明， $\text{Na}_{0.6}\text{CoO}_2$ 和 $\text{g-C}_3\text{N}_4$ 都具有自感电场效应，它们的结合显著增强了内置电场，改善了光生电子的空间分离。与 $\text{g-C}_3\text{N}_4$ (60 mV) 和 $\text{Na}_{0.6}\text{CoO}_2$ (-30 mV) 的表面光电势变化相比， $\text{Na}_{0.6}\text{CoO}_2/\text{g-C}_3\text{N}_4$ 的平均表面接触电势差达到 320 mV，产生了更高的光生电子分离效率。这项工作为异质结构材料存在内置电场和电子流动方向提供了直接证据。

B01-O-25

Superhydrophobic photochromic composite materials promote photocatalytic CO_2 reduction

Yuhao Liu ^{#a}, Hong Qian ^{#a}, Binxia Yuan ^{#a*}, Rui Zhu ^{*a}

Shanghai University of Electric Power

Both photochromism and photocatalytic CO_2 reduction rely on the participation of photoelectrons, and the synergistic improvement of CO_2 conversion efficiency is worthy of research. Meanwhile, the ability of CO_2 adsorption directly affects the rate of electron consumption. Here, we report superhydrophobic photochromic $\text{TiO}_2/\text{Bi}_2\text{WO}_6$ (TBW-2O) nanocomposites, which differs from the previously reported photochromic blue Bi_2WO_6 . TBW-2O in the paper undergoes blackening during photocatalytic reactions, and is bleached by photo generated superoxide radicals ($\cdot\text{O}_2^-$) after stopping the reaction. The microstructure reveals the high activity of the W5d orbitals in the conduction band of TBW-2O, which serves as a site for the rapid sequential consumption and transfer of photogenerated electrons, thus effectively facilitating the separation of electron-hole pairs. Meanwhile, the superhydrophobic surface greatly enhances the adsorption of CO_2 on the surface, which makes the photogenerated electron-hole separation brought about by photochromism effectively utilized. The photocatalysis CO_2 reduction performance of TBW-2O composites is significantly improved. The CH_4 and CO yields are $48.09 \mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ and $37.40 \mu\text{mol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$, which is 19.7 and 6.6 times higher than that of TiO_2 , respectively. The Apparent quantum efficiency (AQY) of CH_4 and CO in TBW-2O photocatalyst under 350 nm monochromatic light are 0.35% and 0.32%, respectively.

B01-O-26

纳米 TiO_2 /矿物基吸附-光催化复合材料的制备与增强的光催化降解性能

刘蕊蕊*、赵春艳、解帅、王静、冀志江

中国建筑材料科学研究总院有限公司

基于吸附剂和光催化剂复合的吸附-光催化复合材料具有比表面积大、孔径均一、分散性好、吸附性强等优点，在净化污染物领域具有很大的应用潜力。二氧化钛与粘土矿物结合作为吸附剂是一种很有前景的双功能固定化光催化剂。粘土矿物包括海泡石、硅藻土、凹凸棒石、膨润土、坡缕石等具有高表面积、强吸附能力、高孔隙率和表面活性位点等优势，可以作为纳米催化剂载体，为催化活性提供更多的反应位点，防止纳米催化剂聚集。因此，矿物负载型光催化剂的独特结构和形态将进一步提高催化剂的催化活性、可回收性，并能显著降低成本。本研究分别将 TiO₂ 纳米粒子高度分散在海泡石、硅藻土、凹凸棒石上，通过简单的方法制备系列 TiO₂/矿物基复合催化剂，采用多种技术对合成的光催化剂的形貌、晶体结构、光学和电化学性能进行了表征，研究了 TiO₂/矿物复合材料在液相和气相光催化降解污染物性能，并讨论了影响光催化性能的因素，基于理论计算及活性物种捕获试验，提出了矿物基复合材料的降解机理。本研究结果为 TiO₂ 作为一种高性能催化剂的制备与应用提供了新的思路，并促进了其在环保问题上的工业应用。

B01-I-32**金属硫化物缺陷调控人工光合成**

于涛*

天津大学

金属硫化物作为典型的窄带系半导体，在能源光催化领域受到广泛关注。金属硫化物因其 S 3p 轨道更离域化，载流子有效质量较轻而具有更好的迁移动力学性质，同时其可调的电子结构、较宽的光谱响应范围，近年来应用在光（电）催化析氢、CO₂ 还原、生物质转化和合成氨等领域。本工作中分别以 CdS 和 ZnIn₂S₄ 为模型催化剂，通过界面调控实现了高效析氢、以及析氢协同生物质转化，继而深入解析了光（热）催化反应机理。

参考文献：

- [1] Yuchen Guo, Jinhua Ye*, Tao Yu*, et.al. Energy & Environmental Science, 2023, 16, 3462.
- [2] Boxin Liu, Tao Yu*, et.al. ACS Nano, 2024, 10.1021/acsnano.4c04562
- [3] Yuchen Guo, Jinhua Ye, Tao Yu*, et.al. Advanced Energy Materials, 2024, 10.1002/aenm.202401285
- [4] Yan Sun, Tao Yu*, et.al. Advanced Functional Materials, 2023, DOI: 10.1002/adfm.202405527
- [5] Haoyu Zhang, Jinhua Ye, Tao Yu*, et.al. Advanced Energy Materials, 2024, 10.1002/adfm.202406549
- [6] Yuan Tang, Junying Zhang*, Tao Yu*, et.al. Advanced Energy Materials, 2023,202203827,
- [7] Junyan Wang, Tao Yu*, et.al. Advanced Functional Materials, 2023, DOI: 10.1002/adfm.202213999
- [8] Yuchen Guo, Tao Yu*, Jinhua Ye*, et.al. Nano Energy, 2022, 95:107028. (ESI 高被引)
- [9] Yuan Tang, Tao Yu*, et.al. Applied Catalysis B: Environmental, 2022, 310(5):121295. (ESI 高被引)

B01-I-33**光解水制氢性能及其光动力学研究**

王文超 1,2, David Lee Phillips2,* , 郭正晓 2,*

1 南京理工大学新能源学院，江苏 214443，中国

2 香港大学化学系，薄扶林道，香港特别行政区，中国

Email: wenchao@njust.edu.cn

光驱动催化转化技术受到广泛的关注，针对传统光催化载流子分离效率不高问题，我们从界面构建、能级调控以及超快时间分辨吸收光谱对功能型光催化材料开展了深入的性能和机理研究，1) 设计制备了一种多孔超薄的 g-C_{3-x}N₄ 纳米材料，利用磷原子间歇位掺杂及其在水中的原位质子化（加质子）的特性，在改性单组分催化剂光动力学领域取得了一定成果，研究表明，通过耦合间歇位“N-P 原子异质结”和碳缺陷，有效的调控材料的能级结构，提高光吸收能力的同时保障了单组分 g-C_{3-x}N₄ 较高的光还原电势，其可见光分解水制氢性能提高了 8 倍¹；2) 制备了具有近场增强效应的氧化镧（In₂O₃）纳米立方和 g-C₃N₄

复合材料, 通过其近场诱导效应提高了 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 中活性载流子的分离和利用效率, 其析氢速率获得数量级提升。通过时域有限差分法模拟近场增强效果和催化热点分布, 飞秒/纳秒时间分辨光谱发现电磁场增强效应极大的提高了 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 中浅层电子捕获寿命, 有效抑制了其深层捕获态²; 3) 针对 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 材料中深层捕获态影响, 通过 sub-band 和 Z-Scheme 协同屏蔽载流子的深层捕获, 提高了活性载流子寿命和定向迁移, 实现无牺牲剂下光催化氧还原和水氧化合成高附加值双氧水³。

参考文献

1. Wang, W.; Du, L.; Xia, R.; Liang, R.; Zhou, T.; Lee, H. K.; Yan, Z.; Luo, H.; Shang, C.; Phillips, D. L.; Guo, Z. *Energy Environ. Sci.* **2023**, 16 (2), 460-472.
2. Wang, W.; Bai, X.; Ci, Q.; Du, L.; Ren, X.; Phillips, D. L., *Adv. Funct. Mater.* **2021**, 31 (35), 2103978.
3. Wang, W.; Zhou, T.; Yang, Y.; Du, L.; Xia, R.; Shang, C.; Phillips, D. L.; Guo, Z., *Small* **2024**, 2312022.

B01-I-34

高性能光催化 CO_2 还原助剂的合理设计

卢康强

(通讯地址: 江西理工大学材料冶金化学学部 江西赣州 中国)

电邮地址: kqlu@jxust.edu.cn)

摘要:

利用石墨烯独特的表面性质和二维形貌特质, 以石墨烯为模板通过简单的低温回流法在其上面合成了一系列过渡金属氢氧化物 ($\text{Ni}(\text{OH})_2$, $\text{Co}(\text{OH})_2$, $\text{Fe}(\text{OH})_3$ 和 $\text{Cu}(\text{OH})_2$)^[1-2]。特别地, 以联吡啶钌为可见光光敏剂, $\text{Ni}(\text{OH})_2$ 纳米片阵列-10%GR 复合材料具有最优异的光催化 CO_2 还原活性和选择性, 在光催化还原纯 CO_2 中, CO 生成速率达到 $10725 \mu\text{mol h}^{-1} \text{g}^{-1}$, 选择性为 96%。更重要的是, 即使在低浓度 CO_2 中 (10% CO_2 , 燃煤发电厂废气中 CO_2 典型的浓度), $\text{Ni}(\text{OH})_2$ -10%GR 复合材料仍表现出优异的光催化性能, CO 产率达到 $7432 \mu\text{mol h}^{-1} \text{g}^{-1}$, 选择性依旧保持在 92%。通过一系列表征表明, 引入石墨烯和构建分层纳米片阵列结构, 能协同性地增强 $\text{Ni}(\text{OH})_2$ -GR 复合材料的 CO_2 吸附能力、提供更多的表面活性位点和促进的电荷载流子分离/转移, 从而提高其光催化 CO_2 还原的性能^[3]。

参考文献

Kang-Qiang Lu, Yue-Hua Li, Fan Zhang, Ming-Yu Qi, Xue Chen, Zi-Rong Tang, Yoichi M. A. Yamada, Masakazu Anpo, Marco Conte, and Yi-Jun Xu*, *Nature Communications*, 2020, 11: 5181.

Kang-Qiang Lu, Yan Chen, Xin Xin, Yi-Jun Xu*, *Applied Catalysis B: Environmental*, 2018, 224: 424-432.

[3] Kang-Qiang Lu, Jin-Ge Hao, Yu Wei, Bo Weng,* Shiyi Ge, Kai Yang,* Suwei Lu, Min-Quan Yang, and Yuhe Liao*. *Inorganic Chemistry*, 2024, 63, 1, 795-802

关键词: 过渡金属氢氧化物; 复合材料; 光催化

B01-I-35

柔性多孔纳米薄膜构筑叠层光催化反应器

袁阔*

天津理工大学

金属-有机框架 (MOFs) 是一类具有周期性孔道结构的晶态材料, 在小分子识别和催化中发挥重要作用。如图 1 所示, 传统催化剂通常是负载型、核壳型等结构, 但是此类材料难以实现对催化活性和催化选择性的协同调控。其关键是如何在纳米粒子 (NP) 催化剂表面构筑一层厚度可控的具有底物活化能力的吸附层材料。我们在负载型催化剂表面构筑一层 MOF 纳米薄膜或 CMP 薄膜, 构筑了 $\text{MOF}@\text{NP}@\text{MOF}$ 和 $\text{MOF}@\text{NP}@\text{CMP}$ 两种三明治结构催化剂, 实现了高效、高选择性的肉桂醛加氢反应。为进一步发展柔性、多孔纳米薄膜复合材料, 我们开发了一套气相诱导的气-液界面策略实现了大面积、柔性、导电 MOF 薄膜的构筑; 为进一步提高薄膜材料的机械特性, 我们引入聚合物分子, 制备了自支撑的 MOF-polymer 复合薄

膜, 并成功制备了柔性电子器件。随后, 在这种大面积导电 MOF 薄膜上可控组装双核金属分子催化剂(DMC)和钙钛矿量子点(PVK), 构筑了[cMOF@DMC]-PVK 薄膜光催化剂, 实现了以水为电子供体的光催化 CO₂ 还原全反应。综上所述, 柔性多孔纳米薄膜的可控构筑对于小分子识别和催化具有重大的理论研究价值和现实应用意义。

B01-I-36

Photo- and electrocatalysis of carbon nitride nanolayer

Guiming Peng*, Suqin Wu, Xiaoying Peng

Jiangxi Normal University

As an efficient environmentally friendly oxidant and potential energy carrier, hydrogen peroxide (H₂O₂) plays a crucial role in various industrial processes. The photocatalytic oxygen reduction production of H₂O₂ by solar energy has attracted considerable attention in virtue of its safety, sustainable and low-cost. Herein, we study a tubular g-C₃N₄ with uniformly dispersed low loading of platinum by one-step method, which significantly enhances the photocatalytic H₂O₂ generation. The hollow structure of tubular g-C₃N₄ not only provides enlarged specific surface area but also facilitates the efficient transport of gaseous reactant (O₂) from the liquid phase to catalyst surface, thereby promoting kinetic mass transfer efficiency. By loading platinum on the tubular g-C₃N₄, the expands the visible light absorption range of tubular g-C₃N₄, and effective light absorption during the photocatalytic reaction. Under visible light irradiation, the obtained Pt (1.03%)/CN exert an H₂O₂ production rate of 232 μmol/gcat/h in pure water, which is 5.27 fold higher than that of obtained with g-C₃N₄ nanotubes, outperforming most reported pt catalysts under similar conditions. Experimental investigation reveals that platinum loading enable a fast separation of photogenerated charge carriers and the reaction process show an one-step one ORR, promoting the selectivity increased from 68% to 90%. This work may provide valuable insights into development of an effective strategy for designing noble metal-based photocatalysts with low metal loading and high catalytic activity.

B01-O-27

C-H 键活化法高效构建聚合物半导体及其光催化制氢研究**

刘诗咏*

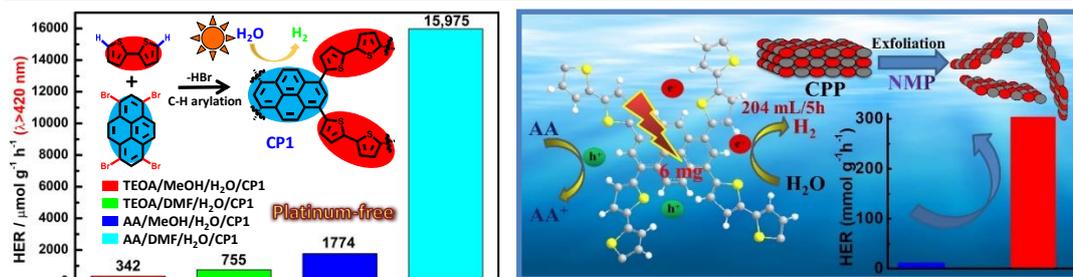
江西理工大学, 赣州, 341000

*chelsy@jxust.edu.cn

采用原子经济性的 C-H 键芳基化反应, 合成了一系列基于苝、苯并噻吩砷、及 EDOT 共轭多孔聚合物及线性聚合物半导体光催化剂[1-4], 并用于光催化制氢研究。苝单元良好的平面性及共轭程度, 可有效提高其聚合物的比表面积及光催化性能, 产氢速率可高达 30.8 mmol h⁻¹ g⁻¹。本研究是绿色化学与绿色能源的相结合 (Green Chemistry for Green Energy) 的良好典范, 对于开发设计新型共轭多孔聚合物以及优化制氢反应体系具有较重要指导意义。

发展了一种提高光催化制氢反应的全新方法, 利用水溶性 N-甲基吡咯烷酮 (NMP) 剥离共轭微孔聚合物材料, 形成聚合物胶体溶液, 用于光催化还原水产氢, 并创造 HER 值高达 303.7 mmol h⁻¹ g⁻¹ 的新纪录。6 mg CMP 催化剂在可见光辐照 5 h 后, 即可产生 204 mL H₂。研究表明, 水溶性非质子型极性共溶剂 NMP 除剥离效应外, 其作为质子受体型反应介质, 可与 H₂O 分子形成氢键作用, 降低 O-H 键断裂所需的活化能, 进而促进 H₂ 的生成。

3,4-乙烯氧噻吩 (EDOT) 是著名导电聚合物 PEDOT 的结构单元。本研究通过分子设计工程的策略, 采用 C-H 键直接芳基化聚合, 成功合成得到 4 种 EDOT 类新型共轭聚合物光催化剂, 其中 BSO2-EDOT 表现出极佳的光催化析氢活性, 无需 Pt 助催化剂, 可见光驱动的产氢速率可达 0.95 mmol h⁻¹ (6 mg), 归一化速率高达 158.4 mmol h⁻¹ g⁻¹, 450~550 nm 波长的可见光区 AQY 值达 11.0~13.6%。通过排水法试验证实, 3 mg BSO2-EDOT 催化剂 3 小时内即可产生 100 mL 氢气。



参考文献

- [1] W. Huang, Z. Shen, J. Cheng, L. Liu, K. Yang, H.-R. Wen, S.-Y. Liu. *J. Mater. Chem. A* **2019**, *7*, 24222.
- [2] J.-Z. Cheng, L.-L. Liu, G. Liao, Z.-Q. Shen, Z. Tan, Y. Xing, X.-X. Li, K. Yang, L. Chen, S.-Y. Liu. *J. Mater. Chem. A* **2020**, *8*, 5890.
- [3] J.-Z. Cheng, Z. Tan, Y. Xing, Z. Shen, L. Liu, Y. Zhang, K. Yang, L. Chen, S.-Y. Liu. *J. Mater. Chem. A* **2021**, 5787.
- [4] Z. R. Tan, Y. Q. Xing, J. Z. Cheng, G. Zhang, Z. Shen, Y. J. Zhang, G. Liao, L. Chen, S.-Y. Liu. *Chem. Sci.* **2022**, *13*, 1725.

B01-O-28

宽光谱响应光/光热催化材料的设计及其 CO₂ 还原性能研究

陈勇*

南京理工大学

用地球上丰富的太阳能驱动 CO₂ 还原，不仅可以降低大气中 CO₂ 的浓度，还可以将 CO₂ 转换为有价值的燃料（如 CH₃OH、CO、CH₄ 等）缓解能源危机^[1]。高效的光催化 CO₂ 转换体系应当具有足够小的带隙以吸收大部分太阳光，同时又具有高的导带底和低的价带顶以满足 CO₂ 还原反应需要的热力学和动力学要求。而同时满足这一条件的单组分 CO₂ 还原光催化剂十分有限。

因为 V 价态可变（从+2 到+5），导致钒酸镍有多种不同化学计量比的结构。通过改变 Ni: V 的比例，调控了钒酸镍（Ni_xV₂O_{5+x}, x = 1, 2, 3）的禁带宽度和带边位置，从而实现了钒酸镍的能带设计，使原本在 NiV₂O₆ 样品中不能够发生的可见光驱动的 CO₂ 还原反应，在 Ni₂V₂O₇ 和 Ni₃V₂O₈ 样品中可以发生，并通过缺陷设计进一步提高了 Ni₂V₂O₇ 可见光光催化 CO₂ 还原活性和选择性^[2]。以过渡金属钒酸盐 A₂V₂O₇ (A = Co、Ni、Cu、Zn) 为研究对象，探究了 A 位阳离子的改变能同时调控钒酸盐 A₂V₂O₇ 的能带结构和表面酸碱碱性，从而影响其相应材料的光催化 CO₂ 活性^[3]。随后，以优化后 Ni₂V₂O₇ 为原料，设计了一种全太阳光谱吸收的微量 Ru 负载的偏钒酸镍催化剂（0.35%Ru@Ni₂V₂O₇），其能够耦合光催化/光热催化实现光驱动的高效 Sabatier 反应，甲烷产出速率约为 32.8 mol g_{Ru}⁻¹ h⁻¹，该活性为当时光驱动下 Ru 基催化剂的最高值^[4]。最近，我们通过原位相分离法，合成了原位生成的金属 Ni 纳米颗粒负载的 VN (Ni/VN) 复合催化剂，该催化剂具有良好的紫外-可见-红外光吸收能力，能够将光能转化热能驱动 CO₂ 氢化反应^[5]。其中 Ni 负责活化 H₂，金属 Ni 和载体 VN 之间的电子金属-载体相互作用，有利于吸附和活化 CO₂，同时，增加对 CO* 中间体的吸附，以上这些优势促使所合成的最优催化剂在不使用任何外加热源的氙灯照射下，CH₄ 平均产率高达 89.4 mmol g_{cat}⁻¹ h⁻¹，为纯 Ni₂V₂O₇ 催化剂的 30 倍，该活性可与某些贵金属基光热催化剂相媲美。该成果为探索可再生能源多元化转化技术提供了新思路。

参考文献

- [1] Y. Chen, G. Jia, Y. Hu, G. Fan, Y. H. Tsang, Z. Li, Z. Zou, *Sustain. Energy Fuels*, 2017, *1*, 1875.
- [2] Y. Chen, Y. Zhang, W. Wang, X. Xu, Y. Li, M. Du, Z. Li and Z. Zou, *Solar RRL*, 2022, *6*, 2200099.
- [3] M. Du, Y. Chen, W. Wang, X. Xu, Y. Li, Y. Zhang, Z. Li and Z. Zou, *Appl. Catal. B: Environ.*, 2022, 317, 121722.
- [4] Y. Chen, Y. Zhang, G. Fan, L. Song, G. Jia, H. Huang, S. Ouyang, J. Ye, Z. Li and Z. Zou, *Joule*, 2021, *5*, 3235.
- [5] Y. Chen, G. Fan, X. Xu, Y. Zhang, Y. Li, Z. Li and Z. Zou, Full-spectrum metal-semiconductor plasmonic resonance coupling catalysts for photothermal CO₂ methanation. (submitted)

B01-O-29

氮化碳纳米材料的抗菌增强策略研究

袁奇娟*

西华大学

石墨相氮化碳 (Graphitic carbon nitride, CN) 作为一种新型的抗菌材料, 通过光激发产生活性氧 (Reactive Oxygen Species, ROS) 破坏细菌的结构和功能而起到杀菌作用, 具有针对性强且不易产生耐药性等优点, 具有很好的应用前景。但是其抗菌效果还不够理想, 尽管纳米粒子在光照条件下产生大量 ROS, 但其总体抗菌能力较弱。这是由于 ROS 反应速度快且半衰期短, 无法充分作用于细菌。大量的 ROS 对正常细胞也会造成氧化损伤。为了解决这一难题, 我们利用氨水辅助碱性热聚合法获得了多巴胺表面改性 CN 纳米材料。研究结果显示, 多巴胺聚合改性的 CN 纳米材料对细菌的亲水性提高, 能够实现粘附捕获和光催化抗菌。同时, 多巴胺的引入也降低了 CN 纳米材料对正常细胞的损伤, 提高 CN 纳米材料的细胞相容性。通过引入妥布霉素还能实现协同抗菌, 提高对感染性伤口的抗菌治疗作用, 有效促进伤口的快速修复。因此, 石墨相氮化碳与多酚类化合物的协同作用, 在生物医学领域具有很好的应用前景。

B01-F-01

CQDs/Bi₄O₅Br₂ 复合光催化剂的设计及光催化性能研究

查曼宁、艾礼莉*

新疆大学化学学院省部共建碳基能源资源化学与利用国家重点实验室

随着环境污染日益加剧, 设计用于降解有机染料的高效光催化剂迫在眉睫, 但仍存在一些挑战。近年来, 碳量子点(CQDs)因其优异的导电性和储存/释放电子的能力, 一直被用作光/电催化剂。本文采用简单水热法, 将由煤制成的 CQDs 负载在 Bi₄O₅Br₂ 纳米片上。CQDs 与 Bi₄O₅Br₂ 的复合不仅提高了光催化材料的可见光吸收能力, 也提高了光生电子空穴的迁移效率。在可见光照射下, 最佳样品 BOB-2 在 15 min 内光催化降解罗丹明 B (RhB) 的效率为 99%。经过 5 次光催化循环试验, BOB-2 样品仍保持 85% 的光催化降解效率。与 Bi₄O₅Br₂ 相比, 性能有显著提升。本工作为煤基碳材料的应用提供了新的视角, 也为设计高效的光催化剂提供了方向。

墙报

B01-P01

Bi₂WO₆/BiOCl 异质结的制备及其光催化性能研究

余晓嫻*

武汉纺织大学

提高光生载流子的分离和迁移效率是增强光催化性能的一个重要途径。利用高压反应釜和微波辅助法合成了一种富含氧空位 (OVS) 的片状 Bi₂WO₆/BiOCl 异质结催化剂。通过改变 Bi₂WO₆ 的含量来调控 Bi₂WO₆/BiOCl 的光催化活性。采用 X 射线衍射(XRD)、傅里叶变换红外光谱(FTIR)、紫外可见漫反射光谱(UV-vis DRS)、N₂ 物理吸附(BET)等对所合成样品进行了表征以盐酸四环素(TC-HCl)为目标污染物, 通过构建催化剂、可见光的反应系统, 系统考察了所合成 Bi₂WO₆/BiOCl 异质结催化剂的催化性能。多种表征结果表明: BOW-10 在 30min 内可降解掉 75% 的盐酸四环素 (20 mg/L, (TC-HCl), 比纯 BiOCl 的活性强 3.3 倍。光催化机理研究表明通过调控 Bi₂WO₆ 的含量大幅度增加了 Bi₂WO₆/BiOCl 的氧空位浓度进而改善了异质结的光催化活性。该工作既提出了通过 Bi₂WO₆ 复合来增强 BiOCl 光生载流子分离效率可能机制, 又提出了改变 Bi₂WO₆ 含量调控超氧自由基浓度来改善可见光催化性能有效方法, 具有重要的研究意义。

B01-P02

Synergy of atom doping and defect construction in marigold-like Zn₃In₂S₆ for improved photocatalytic

hydrogen production

Zhihui Yang, Jian Tian*, Zhihui Yang

Shandong University of Science and Technology

Abstract: Atom doping and defect construction are effective strategies to enhance the performance of photocatalysts. Herein, zirconium (Zr) doping and sulfur vacancies (Vs) are introduced on marigold-like $Zn_3In_2S_6$ (Zr-ZIS-Vs) by controlling the amount of sulfur precursors and $ZrCl_4$ via a one-pot hydrothermal process. Remarkably, the optimized Zr-ZIS-Vs catalyst exhibits excellent photocatalytic activity, giving a photocatalytic hydrogen evolution rate of $9.44 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$, which is 10.73, 4.39 and 2.37 times higher than pure $Zn_3In_2S_6$ (ZIS, $0.88 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$), $Zn_3In_2S_6$ with sulfur vacancies alone (ZIS-Vs, $2.15 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$), and $Zn_3In_2S_6$ with Zr doping alone (Zr-ZIS, $3.98 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$). The apparent quantum efficiency (AQE) of Zr-ZIS-Vs achieves 27.15% and 4.90% at $\lambda=370$ and 456 nm, respectively. Experimental results and theoretical simulations reveal the behavioral mechanisms of the deletion of S atoms and the tendency of Zr to replace In, indicating that the defective and reference strategies can narrow the band gap, provide abundant active sites, enhance the effective transport and separation of photogenerated carriers, and modulate the transfer of active sites to empirical site S atoms to achieve the synergistic thermodynamic and kinetic interactions, which effectively enhances the performance of photocatalytic hydrogen production.

B01-P03**在超薄 $WS_2/Zn_3In_2S_6$ 纳米片中构建 S 型异质结构以提高光催化产氢性能**

刘芊*

山东科技大学

金属硫化物基光催化剂是经济、环保且可再生的。然而，光电子与空穴的快速复合和太阳能利用效率低仍然是一个巨大的瓶颈。本工作设计了二维/二维(2D/2D) S-scheme 的 $WS_2/Zn_3In_2S_6$ 异质结构，超薄纳米片穿插在相邻组分之间。大而紧密的 s 型异质结促进了界面电荷的分离/转移，并优化了可用的氧化还原电位。此外，超薄的 2D/2D 异质结构保证了大的比表面积、最大的界面协同作用和表面活性位点的有效暴露。结果表明，在模拟太阳光照下，2 wt% $WS_2/Zn_3In_2S_6$ 的光催化产氢率为 $30.21 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ ，在 370 nm 单色光下的表观量子效率为 56.1%，远远超过原始 $Zn_3In_2S_6$ ($6.65 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$)。DFT 计算表明，异质结的存在有利于在界面处形成内置电场，其带边弯曲和库仑相互作用可以抑制 $Zn_3In_2S_6$ 的 CB 与 WS_2 的 VB 空穴的复合， $Zn_3In_2S_6$ 中光生电子的强还原能力和 WS_2 中光生空穴的强氧化能力得到了保留，在 $Zn_3In_2S_6$ 体系中实现了较高的电荷分离/转移效率。我们的工作强调了将形态学工程和 S 型异质结设计相结合用于高效低成本光催化剂的重要性。

B01-P04**A general strategy for the enhanced H_2 production performance of CdS/noble metal sulfide nanorods photocatalysts by cation exchange**

Shanna An*

Shandong University of Science and Technology

In this work, we report a series of noble metal (Ag, Au, Pt, etc.) sulfides that act as co-catalysts anchoring on CdS nanorods (NRs) obtained via a cation exchange strategy to promote photocatalytic hydrogen evolution. CdS NRs are first generated via a hydrothermal routine, noble metal sulfides are then in-situ grown on CdS NRs by a cation exchange method. CdS/Ag₂S, CdS/Au₂S and CdS/PtS NRs show improved hydrogen production rates (2506.88 , 1513.17 and $1004.54 \text{ }\mu\text{mol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$, respectively), approximately 18, 11 and 7 times higher than CdS NRs ($138.27 \text{ }\mu\text{mol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$). Among CdS/noble metal sulfide NRs, CdS/Ag₂S NRs present the best H_2 production performance. The apparent quantum efficiency (AQE) of CdS/Ag₂S NRs achieves 3.11 % at $\lambda = 370$ nm. The improved photocatalytic performance of CdS/noble metal sulfide NRs dues to the following points: i) Noble metal sulfides on CdS NRs are beneficial for elevating light-absorbing and light-utilizing capacities,

contributing to generating more photoexcited charges; ii) Noble metal sulfides are in-situ grown on CdS NRs as electron acceptors by a cation exchange method, thus the photoexcited electrons generated by CdS NRs rapidly migrate to the surface of noble metal sulfides, successfully accelerating the carriers separation efficiency. This series of noble metal sulfides acting as co-catalysts anchoring on CdS NRs offer new insights into the construction principles of high-performance photocatalytic hydrogen evolution catalysts.

B01-P05

SPR 与晶面结协同增强 Bi/BiOBr 纳米环光催化降解抗生素类新污染物的研究

宋硕、梁乾伟*

浙江师范大学

抗生素的过度使用在人类医疗和兽医实践中普遍存在，由于其较低的环境降解效率，已对生态环境构成了严重威胁。本研究开发了一种新型的 Bi/BiOBr 纳米环光催化剂，在可见光照射下对抗生素类新污染物实现了高效降解。利用一定浓度的硝酸溶液对 BiOBr 纳米片进行了选择性刻蚀，以充分暴露其高活性的(001)晶面，并利用 NaBH₄ 溶液在 BiOBr 表面原位还原出 Bi 纳米颗粒，构建了 Bi/BiOBr 光催化剂。Bi/BiOBr 纳米环光催化剂在可见光照射条件下，90 min 内对 10 mg/L 的四环素溶液的降解率可达 97%，同时该催化剂具有良好的循环利用性能。该催化剂卓越的光催化性能归因于(001)晶面与(110)晶面间形成的 II 型异质结构以及表面等离子体共振效应 (SPR) 的协同作用，显著提升了催化剂的光吸收能力和电荷分离效率。本研究的结果以期新型绿色高效光催化剂的设计与制备提供理论依据，为抗生素类新污染物的治理提供新思路。

B01-P06

Ag@ZnIn₂S₄ 复合光催化剂的制备及其产氢性能研究

郑佳成、谭红琳*

昆明理工大学

ZnIn₂S₄ 因具有合适的带隙结构(2.06~2.85 eV)和良好的光电化学特性，在光催化产氢领域受到了广泛关注，然而，光生载流子复合严重、电荷动力学和表面反应动力学迟缓、光化学稳定性差造成 ZIS 的光催化活性低下，纯 ZIS 的光催化性能并不理想。等离子体金属 Ag 中的 LSPR 效应被用来改善半导体的光电响应，有利于局部场增强、等离子体诱导共振能量转移、热电子注入、光热效应等，是提高光催化效率的有效手段，我们用多元醇法制备得到具有棱角尖锐、粒径均一的银纳米立方体 (AgNCs)，并将立方相 ZIS 包覆于 50nm 和 90nm 银核表面，通过改变 ZIS 在银上的包覆厚度，制备得到包覆比例 d(Ag): d(Ag@ZIS) = 1: 1.5 和 1: 3 的四种 Ag@ZIS 复合材料，分别讨论了银核大小与 ZIS 厚度对光催化性能的影响。结果表明，50nm 银相比于 90nm 银有更强的 LSPR 吸收、更高的产氢性能，包覆比例 d(Ag): d(Ag@ZIS) = 1: 3 时复合材料具有最好的光催化活性，在可见光下的产氢效率为 1320.47 μmol·g⁻¹·h⁻¹，比纯相 ZIS 高出 29 倍之多。据此，我们揭示了金属银颗粒尺度和形貌在促进 ZIS 催化反应中的相关性，并证明了金属银在提升 ZIS 催化活性中的积极作用。

B01-P07

Engineering Atomic Ag¹-N₆ Sites with Enhanced Performance of Eradication Drug-Resistant Bacteria over Visible-Light-Driven Antibacterial Membrane

Shaosheng Rao¹, Zhongti Sun¹, Qinqin Liu¹, Juan Yang^{*1}, Yongfa Zhu²

1. Jiangsu university

2. Tsinghua University

Utilizing visible light for water disinfection is a more convenient, safe, and practical alternative to ultraviolet-light sterilization. Herein, we developed a silver (Ag) single-atom anchored g-C₃N₄ (P-CN) nanosheets (Ag¹/CN) and then utilized a spin-coating method to fabricate the Ag¹/CN-based-membrane for effective antibacterial performance in natural water and domestic wastewater. The incorporated Ag single atom formed an

Ag1-N6 motif, which increased the charge density around the N atoms, resulting in a built-in electric field approximately 17.2 times stronger than that of pure P-CN and optimizing the dynamics of reactive oxygen species (ROS) production. Additionally, the Ag1-N6 motif inhibited the release of Ag ions, ensuring good biocompatibility. Based on the first principles calculation, the adsorption energy of O₂ on the Ag1/CN (-0.32 eV) was lower than that of P-CN (-0.07 eV), indicating that loaded Ag single atom can lower the energy barrier for O₂ activation, generating extra ·OH radicals that cooperated with ·O²⁻ to effectively neutralize bacteria. As a result, the Ag1/CN powder-catalyst with the concentration of 30 ppm demonstrated a 99.9% antibacterial efficiency against drug-resistant bacteria (*Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus*, kanamycin resistant *Escherichia coli* and methicillin resistant *Staphylococcus aureus*) under visible light irradiation for 4 hours. This efficacy was 24.8 times higher than that of P-CN powder-catalyst. Moreover, the Ag1/CN-based-membrane can maintain a 99.9% bactericidal efficiency for natural water and domestic wastewater treatment using a homemade flow device, demonstrating its potential for water disinfection. Notably, the visible-light-driven antibacterial efficiency of the Ag1/CN catalyst outperformed the majority of reported g-C₃N₄-based catalysts/membranes.

B01-P08

CoFeAl-LDH in situ self-polymerisation PDA coating strategy for efficient and stable photothermal co-catalysis of sodium borohydride for hydrogen production

Yexin Jiang, Juan Yang*

Jiangsu University

Hydrolysis of NaBH₄ is considered a promising form of hydrogen production due to its high hydrogen content and safety, which requires the development of efficient, reusable and inexpensive catalysts. Inspired by nature, polydopamine (PDA)-coated Co-Fe-Al layered double hydroxides (CoFeAl-LDH@PDA) have been designed by in situ autopolymerisation for photothermal co-catalysis of NaBH₄ to produce H₂. The close contact between PDA and CoFeAl-LDH creates a heterogeneous structure, which accelerates the photogenerated charge transfer and the efficiency of electron-hole partitioning, resulting in the photocatalytic activity greatly enhanced. Moreover, the addition of PDA enhanced the absorption of light by the catalyst, which made the system have higher heat in the photothermal conversion, and promoted the photothermal synergistic catalytic hydrogen production. The hydrogen production rate of the system reached 6546 mmol g⁻¹ h⁻¹, which was 1.9 times higher than that of pure CoFeAl-LDH. In addition, the cycling stability of CoFeAl-LDH@PDA was significantly improved by the protective layer of PDA, and 85% of the initial yield could be maintained after 5 cycles. The structure design is reasonable, which provides a new idea to further promote the practical application of NaBH₄ photothermal catalysis for hydrogen production.

B01-P09

超密度孔氮化碳纳米片的合成及光催化性能研究

程思、苗立锋、包镇红、梁健、江向平、余永志*

景德镇陶瓷大学

类石墨氮化碳 (GCN) 作为一种类似石墨的层状结构聚合物材料, 其优异的热稳定性和化学惰性、环境友好以及可调控的电子结构和易于制备等优点, 在环境治理、能量转换与存储等方面具有广阔的应用前景。相对于体相的层状结构材料, 其对应的超薄 (少层或单层) 二维结构纳米片往往展示出更为优异的性能, 甚至获得全新的特性。本课题通过一种简便实施、经济廉价的自下而上的方法, 即巧妙地引入高浓度硫酸到三聚氰胺-三聚氰酸体系中, 调控超分子自组装过程, 并经热处理后高效、直接获得超密度孔 GCN 纳米片。采用多种表征手段对超密度孔 GCN 纳米片的形貌、结构、光电性能以及在光催化降解罗丹明 B (RhB) 方面进行了详细研究。

B01-P10

二维光催化异质结中的超快载流子动力学：第一性原理与非绝热分子动力学计算

巩泽龙、钱钊*

山东大学材料科学与工程学院

载流子超快动力学对异质结的光催化性能至关重要，然而合理地设计载流子超快动力学却十分困难。在此，我们结合第一原理计算与非绝热分子动力学 (NAMD) 方法，研究两种新型异质结 (GaN/SnS₂ 和 GaN/HfS₂) 的载流子动力学。尽管两异质结具有相似的基态电子性质，但 NAMD 揭示了载流子动力学中的显著差异。与 GaN/HfS₂ 相比，GaN/SnS₂ 具有更快的层间载流子复合与较慢的层间电子转移过程，从而保护了具有强还原能力的光生电子。深入研究表明，非绝热耦合在载流子超快动力学方面起到重要的作用。分布于异质结界面处的电荷和高度离域化的波函数导致了强的非绝热耦合，从而加速了层间载流子复合。相反，由于大的能级差而引起的弱非绝热耦合则阻止了层间光生电子迁移。这项研究为载流子超快动力学以及高性能光催化剂的设计工作提供了新的见解和理论指导。

B01-P11

光催化二氧化碳环加成反应应用高效光催化剂的设计合成

程若霖*

江苏省徐州市中国矿业大学碳中和研究院

CO₂ 的捕集与利用是实现碳中和的关键技术之一，但受限于 CO₂ 的高稳定性，很难将捕获的 CO₂ 转化为具有高附加值的化学产品和燃料，难以满足商业化需求。通过 CO₂ 与环氧化物的环加成反应合成环状碳酸酯是一种极具吸引力的长期碳固定策略，具有 CO₂ 转化率高、产物附加值高的优势。环状碳酸酯作为锂离子电池的电解质和精细化学合成的中间体，全球需求量持续增长。为了克服 CO₂ 和环氧化物的活化障碍，环状碳酸酯的生产通常要在高温高压下进行，迫切需要开发能够在温和的反应条件下发挥作用的活性催化剂，以大幅降低反应能耗。

我们首次提出以富含氧空位的缺陷氧化钨 (W₁₈O₄₉) 替代现有研究聚焦的有机金属框架材料 (MOFs) 构建光催化 CO₂ 环加成反应体系，利用太阳光活化 CO₂ 和环氧化物，实现了室温常压下的高效 CO₂ 环加成反应。采用溶剂热法实现了 W₁₈O₄₉ 在石墨相氮化碳 (g-C₃N₄)^[1]、生物炭、铅基 MOF (NH₂-UiO-66)^[2] 上的原位负载，构建了多种具有典型 II 型异质结的复合光催化剂，拓宽催化体系的光吸收能力，促进光生载流子分离与迁移，碳酸苯乙烯酯产率大幅提升，最高可达 271 mmol g⁻¹h⁻¹，该性能在目前已报道的光催化体系中位居前列。路易斯酸碱位点和光生载流子在氧化苯乙烯开环和 CO₂ 活化步骤中发挥重要作用，为在温和条件下实现 CO₂ 环加成反应提供了一种新型催化剂设计策略。

参考文献

[1] Ruolin, Cheng; Anhu, Wang; Shuxun, Sang; Huagen, Liang; Shiqi, Liu; Panagiotis, Tsiakaras. Chem. Eng. J. 2023, 466: 142982.

[2] 程若霖; 王浩然; 任静; 马莹莹; 梁华根. 无机化学学报, 2024, 40(3): 523-532.

B01-P12

雪花状 Cu₂S 与超薄 ZnIn₂S₄ 纳米片自组装形成 S 型异质结，用于可见光光催化析氢

杨智慧、Jian Tian*

山东科技大学

阶梯型 (S-scheme) 异质结在光催化剂异质结构的设计中备受关注。本研究成功地利用静电自组装原理，通过简单的研磨方法将超薄的 ZnIn₂S₄ 纳米片负载到雪花状的 Cu₂S 上，并根据不同的功函数 (Φ) 合成了 Cu₂S/ZnIn₂S₄ S 型异质结。在最佳 Cu₂S 负载率 (5 wt%) 下，Cu₂S/ZnIn₂S₄ 复合材料的氢产率达到 5.58 mmol h⁻¹g⁻¹，是纯 ZnIn₂S₄ (1.09 mmol h⁻¹g⁻¹) 的 5.12 倍。Cu₂S/ZnIn₂S₄ 复合材料的表观量子效率 (AQE) 达到 5.8% ($\lambda = 370$ nm)，与纯 ZnIn₂S₄ (2.7%) 相比有所提高。Cu₂S 和 ZnIn₂S₄ 的异质结界面建立了一个内置电场 (IEF)，大大降低了光生电子和空穴的重组率，在 ZnIn₂S₄ 的导带 (CB) 中保留了高度还原的光电子。Cu₂S 的雪花结构有效地增加了活性位点和比表面积，提高了光吸收能力。这项工作为设计光催化剂、协同开发能源和保护环境开辟了一条新途径。

B01-P13**氧化镓钝化的铋酸铜光阴极用于光电化学水分解**

胡颖飞*、郭苏杨、闵欣怡

金陵科技学院

铋酸铜 (CuBi_2O_4) 的带隙约为 1.8eV, 是一种非常有应用前景的光电化学 (PEC) 水分解材料。本文以 CuBi_2O_4 光阴极作为研究对象, 以提升其载流子输运性能为主要目的, 采用金属有机物热分解法制备了纯 CuBi_2O_4 和 $\text{Ga-CuBi}_2\text{O}_4$ 光阴极。光电流测试结果显示, 在 0.35 V vs. RHE 下, 滴涂 10 μL 的 0.0025 M 镓源所得的 $\text{Ga-CuBi}_2\text{O}_4$ 光电流密度最大, 达到 0.303 mA cm^{-2} , 相较于纯 CuBi_2O_4 提升了 20%; 在 1.0 V vs. RHE 时, 纯 CuBi_2O_4 和 $\text{Ga-CuBi}_2\text{O}_4$ 光阴极的电荷注入效率分别为 1.5% 和 27.6%, 表明 Ga 元素的引入大幅提高了 CuBi_2O_4 的电荷注入效率。OCP 显示 $\text{Ga-CuBi}_2\text{O}_4$ 光阴极比纯 CuBi_2O_4 的电荷分离能力更强。Mott-Schottky 数据表明 $\text{Ga-CuBi}_2\text{O}_4$ 的平带电势正向偏移。电化学阻抗的结果表明 $\text{Ga-CuBi}_2\text{O}_4$ 具有比纯 CuBi_2O_4 更小的界面电荷转移电阻, 意味着其表面反应更快。通过稳定性测试得出 $\text{Ga-CuBi}_2\text{O}_4$ 光阴极具有相对较好的稳定性。综合上述结论, 引入 Ga 元素可以钝化 CuBi_2O_4 光阴极的表面态, 抑制载流子的表面复合, 提高载流子的分离效率, 从而提高 PEC 性能。

B01-P14**Ir,P 双位点活化高效降解 PET**

涂颖*

深圳大学

近年来, 塑料污染成为全球环境问题的重要组成部分。聚对苯二甲酸乙二醇酯 (PET) 作为一种广泛使用的塑料, 在环境中的长期存在对生态系统产生了严重影响。开发高效、可持续的光催化材料以降解 PET 成为当前研究的热点之一。我们通过煅烧和热沉积的方法制备了一种含有 Ir 和 P 双活性位点的氮化碳光催化材料。使用 X 射线光电子能谱 (XPS)、傅里叶红外光谱 (FTIR) 和紫外-可见漫反射光谱 (UV-Vis DRS) 等手段对其结构和光电性能进行了表征。我们发现, 制备的 Ir 和 P 双活性位点的氮化碳光催化材料表现出优异的光催化活性, 能够有效降解 PET。在 420nm 蓝光照射下, 6h 内 PET 的降解率达到了 92.7%, 证明了该材料在光催化降解 PET 过程中的高效性能。本研究成功合成了一种新型 Ir 和 P 双活性位点的氮化碳光催化材料, 并证明其在降解 PET 方面的显著应用潜力。这一成果不仅为解决塑料污染问题提供了新的思路和方法, 也为光催化材料设计 and 应用领域的进一步研究提供了有价值的参考。

B01-P15**通过阳离子-阴离子耦合增强 C_3N_4 激子离解高效产 H_2O_2**

李俊青*

深圳大学

过氧化氢已在纺织、食品加工、造纸、医疗保健和废水处理等多个领域得到了广泛的应用。来自这些领域的巨大需求导致了全球过氧化氢产量的稳步增长。太阳能驱动的光催化通过氧还原反应 (ORR) 产生过氧化氢, 由于其低能耗、安全和环境友好性, 是一种解决能源和环境危机的很有前途的方法。我们采用熔盐法以及调控氰基来制备了具有氰基缺陷的高结晶性氮化碳, 通过一步煅烧实现了其合成。通过 X 射线衍射 (XRD)、X 射线光电子能谱 (XPS)、傅里叶变换红外光谱仪 (FTIR)、电子顺磁共振波谱仪 (ESR)、光致发光光谱 (PL)、电化学工作站等对其结构和光电性能进行了表征。我们发现制备的催化剂增强了激子解离, 光照 1h H_2O_2 的浓度就达到了 2329 $\mu\text{mol/L}$, 是纯氮化碳的 46 倍。本研究采用熔融盐方法实现了高结晶 PCN 的合成, 同时具有氰基官能团修饰和 K 掺杂。有效地控制氰基的数量, 从而提高激子的解离效率, 表现出最佳的载流子分离效率和电荷转移速率。我们的工作提供了一种新的视角, 将阴离子和阳离子物质结合到光催化剂中, 通过两种掺杂剂之间的强电子耦合效应来增强激子的解离, 最终实现过氧化氢的高效合成。

仅发表论文

B01-PO01

海胆状空心 SnO₂ 的合成及其光催化性能研究

王兴国、潘鑫、李慧泉*

阜阳师范大学

作为一种新型材料,海胆状空心材料近年来引起了全球科学家的高度关注^[1]。SnO₂ 因其具有较高的氧化能力而在有机污染物降解领域中显示出巨大的应用潜力^[2]。现有的研究表明:海胆状空心结构材料可以提高光的捕获能力、改善材料中光生电荷的分离效率,从而显著提高材料的光催化性能^[3]。因此,在本工作中,我们采用了水热合成法成功制备了海胆状 SnO₂ 空心材料,研究了海胆状空心 SnO₂ 材料在可见光催化下降解有机污染物与反应机理,并探讨了海胆状 SnO₂ 空心材料的结构与性能之间的关系及调控规律。本工作可为光催化降解有机污染物高性能海胆状空心材料的构建提供重要参考价值。

参考文献

- [1] Zhu S, Xing M, Lu Z, et al. Sea urchin-like CoTe-CoP heterostructure catalyst for efficient hydrogen evolution in all-pH range[J]. Science China Materials, 2024.
- [2] Kumari H, Chahal S, Kumar P, et al. Photocatalytic degradation of RB dye via cerium substituted SnO₂ photocatalysts[J]. Materials Science and Engineering: B, 2023.
- [3] Lee J W, Nam S H, Yu J H, et al. Morphological modulation of urchin-like Zn₂SnO₄/SnO₂ hollow spheres and their applications as photocatalysts and quartz crystal microbalance measurements[J]. Applied Surface Science, 2019.

B01-PO02

CoOOH/CdIn₂S₄ 光阳极驱动无偏串联电池选择性苯甲醇氧化和 CO₂ 还原产乙醇卫怡青¹、何辉超²、杨淑媛³、张永才⁴、周新³、邹志刚^{1,5}、周勇^{*1,5,6}

1. 南京大学
2. 重庆科技大学
3. 大连大学
4. 扬州大学
5. 香港中文大学(深圳)
6. 安徽工程大学

本文设计并研究了 CoOOH/CdIn₂S₄ 薄膜,其作为光阳极与 Cu₂O 阴极结合组装无偏串联电池,分别驱动苯甲醇氧化和 CO₂ 还原生产苯甲醛和乙醇。CdIn₂S₄ 光阳极与 CoOOH 助催化剂的耦合载流子复合下降,氧化苯甲醇的活性、动力学和选择性明显提高。原位拉曼、EPR 和 O¹⁸ 同位素标记研究共同表明,在 CoOOH/CdIn₂S₄ 光阳极上,苯甲醇氧化为苯甲醛是由羟基自由基的形成和 CoOOH 共催化剂活性晶相的变化介导的。DFT 计算表明,CoOOH 与 CdIn₂S₄ 的耦合在能量上更有利于苯甲醇的吸附和活化。结果表明,CoOOH/CdIn₂S₄ 光阳极对苯甲醇氧化成苯甲醛的法拉第效率(~99%)和选择性(~99%)均高于 CdIn₂S₄ 光阳极(法拉第效率:70.68%;选择性:67%)。此外,在 CoOOH/CdIn₂S₄ 光阳极-Cu₂O 阴极无偏电池中,通过 CO₂ 还原在 Cu₂O 阴极上得到了典型的 C₂ 产物乙醇。CoOOH/CdIn₂S₄ 光阳极可以稳定地驱动无偏电池,反应 4h 后仍保持 88%的初始活性。

B01-PO03

铋铈溴片状材料光催化降解有机污染物的研究

段佳奇¹、丁东¹、樊红雷²、刘洪亮^{*2}

1. 烟台先进材料与绿色制造山东省实验室

2. 烟台大学

抗生素因其抗菌谱相对较广、抗菌活性强且价格低，被广泛应用于预防和治疗人类细菌感染、水产养殖和畜牧业中，然而，在其生产合成过程中多在有机系统中存在残留。降解有机体系中抗生素的方法可分为生物降解法、物化处理法和高级氧化法，其中高级氧化法可避免发生二次污染，具有催化活性高、可回收利用和稳定性好等优点。钙钛矿类催化剂在高级氧化法中占据重要地位。本文通过反溶剂冷却结晶法制备得到铯铋溴 ($\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$)，该方法无需高温高压，反溶剂的加入使其横向生长速度远大于纵向生长速度，得到六边形薄片。所得 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 具有比表面积大、高吸收系数、光响应范围可达 500 nm、可调能带结构、长载流子寿命等一系列独特的光物理性质。同时，它还表现出良好的抗生素光降解活性，80 min 内对盐酸四环素 (TC-HCL) 的降解率可达 80.8%，且便于回收。反溶剂的加入使该催化剂获得高催化活性晶面，使得电子-空穴对复合率低，促进了光生电子-空穴的有效分离。通过自由基捕获实验证明，单线态氧、超氧自由基、羟基自由基和空穴同时参与降解抗生素的一系列催化氧化反应，且不同活性种之间存在转化关系。普适性实验证明，该催化剂适用于多种有机污染物的降解。这项工作为有机体系中降解有机污染物提供了新的解决方案。