



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

B04-资源材料与循环利用
B04-Reduce, Reuse, Recycle and
Recover of Resource Materials

Organized by

Chinese Materials Research Society

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

B04.资源材料与循环利用

分会主席：赵跃民、何宏平、袁鹏、廖立兵、梁金生、杨华明、冯培忠

致辞

何宏平

中国科学院广州地球化学研究所

B04-01**黏土矿物纳米结构与元素的综合利用**

朱润良

中国科学院广州地球化学研究所

摘要内容暂未收到

B04-02**废旧锡铅回收及其光电器件利用**

严克友*

华南理工大学

随着铅蓄电池和焊锡等在储能、电子等领域的大规模应用，我国再生锡铅行业快速发展。锡铅产品报废数量大，再生利用具有很高的资源和环境价值。本报告针对当前铅酸电池、焊锡等资源回收问题，提出其卤化回收策略，发展湿火湿等工艺，获得高质量卤化物半导体，并用于制备高性能钙钛矿光电器件，显著降低新型光电器件的制造成本，并实现废旧资源的高值化利用。

B04-03**面向 CO₂ 电还原制高值化学品的煤基碳材料基础研究**

徐朗*

中国矿业大学

电催化还原 CO₂ 制高值化学品面向国家发展战略及重大需求，在加快推动能源绿色低碳转型中发挥重要的作用。开发高性能煤基碳材料有助于实现我国煤炭行业在双碳目标下的低碳转型。当前的电催化材料对电还原产物的法拉第效率和电流密度较低。针对电催化还原 CO₂ 制高值化学品高选择性和高活性的需求，利用中高阶煤抗酸碱/抗电化学腐蚀强及煤基碳载体粒径/孔径分布可调控等优势，本报告提出中高阶煤基三相界面的构筑方法，采用限域锚定、非金属元素掺杂/修饰晶面、缺陷增强等策略，建立煤基碳载体对催化剂的支撑保护作用与界面电化学的关联性，调控催化剂-载体表界面的电子结构和化学环境，优化表界面对反应底物和关键中间体的吸附和活化能力，揭示煤基三相界面传质与传荷过程的调变规律，为煤基电催化材料制备及多场耦合电还原 CO₂ 规模化制高值化学品提供理论和技术支撑。

B04-04**基于埃洛石纳米管表面改性构建 X 射线辐射发光材料及应用探究**

张海磊*、张博

河北大学

X 射线闪烁体是一类可以将高能 X 射线辐射转换为可见或近可见光的特殊材料。开发与聚合物基质具有良好分散性和优异水分散性的新型 X 射线闪烁体纳米材料是该领域的热点问题。本研究中，我们以具有良好聚合物相容性和水分散性的天然纳米矿物材料埃洛石纳米管为基材，将柠檬酸配体分子修饰在埃洛石纳米管表面，在纳米管表面原位合成铽基 X 射线闪烁体，并将其粒径控制在纳米尺度。合成的纳米复合材料(HNTs@Na₅Lu₉F₃₂:Tb³⁺)可在 X 射线辐射下发射强绿色荧光，在 X 射线照射的开关切换后显示出同步

放射性发光行为,显著改善了 X 射线闪烁体材料的聚合物相容性和水分散性。我们进一步针对不同领域的应用开发了三种材料:1)具有辐射致发光特性的复合聚氨酯泡沫材料,可进一步与可穿戴材料复合,用于辐射泄露实时监测;2)可用于 X 射线成像柔性聚乙烯醇水凝胶闪烁体屏幕,为非曲面成像系统的构建提供有益尝试;3)用于多级防伪信息加密的动态共价键组装多层水凝胶,其在自然光下无法读取信息,紫外光下呈现“伪信息”,真实信息仅可在 X 射线下呈现。上述研究成功拓展了 X 射线闪烁体材料在柔性复合材料领域的应用,也为埃洛石基矿物材料的精细化和高附加值化发展提供有力支持[1,2]。

参考文献:

[1] Hailei Zhang*, Bo Zhang, Chongyang Cai, Kaiming Zhang, Yu Wang, Yuan Wang, Yanmin Yang*, Yonggang Wu, Xinwu Ba, and Richard Hoogenboom*. Water-dispersible X-ray scintillators enabling coating and blending with polymer materials for multiple applications. *Nature Communications*, 2024, 15: 2055.

[2] Hailei Zhang*, Boyan Tang, Bo Zhang, Kai Huang, Shanshan Li, Yuangong Zhang, Haisong Zhang, Libin Bai, Yonggang Wu, Yongqiang Cheng, Yanmin Yang*, and Gang Han.* X-ray-activated polymerization expanding the frontiers of deep-tissue hydrogel formation. *Nature Communications*, 2024, 15: 3247.

B04-05

多孔聚离子液体高选择性吸附分离

张卫懿*

东华大学

有吸附与分离用多孔高分子是我国现阶段发展所需的关键性战略材料,由于其低能耗与高选择性的特点,被广泛应用于各类元素与化合物的分离、回收、捕获、去除,如海水淡化、药物分离、防污净化、金属富集等等。随着国家对不可再生战略资源富集/回收的日益重视,吸附与分离用多孔高分子被更多应用于以上战略领域,因而对此类材料提出了更高的要求。然而,实际应用场景需要多孔高分子本身兼具高通量物质运输与高选择性吸附/分离,以实现最高效的分离/回收/捕获;然而,现实应用中两者难以同时达成:吸附多会迟滞流体流动导致输运慢,输运快则作用时间短而导致吸附少,极大限制了此类材料的功能发挥。

针对以上难题,从流体输运原理出发,报告人通过研究传质速率方程和流体控制方程(图 1),调控扩散、压降等参数,增加传质动力、降低传质阻力,可以实现吸附/分离与输运功能的提升。根据以上原理与规律,申请人探索了如何设计兼具高选择吸附/识别与高通量分离的多孔高分子,开展了以下系统研究工作:(1)引入专一性吸附/识别位点:发现并提出了“卡宾”基团的选择性吸附与识别的新方法,构建了对金离子、质子具有专一性吸附/识别作用的有机多孔聚卡宾块材/膜;(2)构建特异型孔道结构:提出了模板介导法构筑仿生梯度孔道结构新路线,制备了具有连续梯度结构的膜材料,阐明了特异型孔道结构对流体输运与分子筛分的作用机制。以第一/通讯作者发表了 *Nat. Commun.* (2 篇)、*Adv. Mater.* (2 篇)、*Angew. Chem. Int. Ed.* (1 篇)、*ACS Nano* (2 篇)和 *Prog. Polym. Sci.* (1 篇)等 SCI 论文,2 篇论文入选 ESI 高被引论文;相关研究成果被国家工信部、英国 Nature Research Chemistry Community、Nature Materials Community,德国 Wiley Chemistry Views 杂志等媒体重点报道。

参考文献

[1] Zuo, H.; Lyu, B.; Yao, J.; Long, W.; Shi, Y.; Li, X.; Hu, H.; Thomas, A.; Yuan, J.; Zhang, W*.; Liao, Y. * *Adv. Mater.* 2024, 202305755.

[2] Li, X.; Wang, Y.-L.; Wen, J.; Zheng, L.; Qian, C.; Cheng, Z.; Zuo, H.; Yu, M.; Yuan, J. Li, R.; Zhang, W.* Liao, Y.* *Nat. Commun.* 2023, 14, 263.

B04-06

聚合物粘土纳米复合水凝胶: 从合成到应用

顾晓滨

中国科学院广州能源研究所

摘要内容暂未收到

B04-07**基于黏土矿物的有机-无机纳米复合材料及其应用**

庄官政*

广东工业大学

有机-无机纳米复合材料兼具有机材料和无机材料的优点，在功能材料、环境材料、生物医药材料等领域具有广泛的应用潜力。黏土矿物具有纳米结构、热稳定性好、机械强度高、吸附能力强、流变性能突出等特点，是制备有机-无机纳米复合材料的优良载体。例如，古代玛雅人就以坡缕石和植物染料靛蓝为原料制备了举世闻名的“玛雅蓝”颜料。研究表明，靛蓝分子进入坡缕石结构中的纳米通道，并与通道两侧的配位水分子形成氢键，从而形成稳定的蓝绿色颜料。基于玛雅蓝的形成机制，开发了系列黏土矿物基有机-无机纳米复合颜料，结果表明黏土矿物（特别是坡缕石和海泡石）可以作为高性能复合颜料的优良载体，所制得的颜料具有突出的光稳定性和化学稳定性。另一方面，基于矿物的有机-无机纳米复合材料还可以改善矿物本身的表界面性质，从而提高在有机体系中的应用性能。将蒙脱石、坡缕石和海泡石等黏土矿物与有机表面活性剂结合，获得有机-无机流变材料，在油基和合成基钻井液中表现出优异的流变特性和热稳定性。总之，黏土矿物是开发有机-无机纳米复合材料的优秀载体，深入探索黏土矿物与有机分子之间的界面作用及其机制，将有助于扩展黏土矿物和有机-无机纳米复合材料的应用。

B04-08**煤矸石资源特性与高值化利用**

刘钦甫

中国矿业大学（北京）

摘要内容暂未收到

B04-09**粉煤灰/生物质固废的快速腐殖化及其土壤利用研究**

宿新泰

华南理工大学

摘要内容暂未收到

B04-10**光伏硅基固废的提纯及循环利用研究**

李鹏廷*、李佳艳、谭毅

大连理工大学

在光伏产业蓬勃发展的背景下，光伏硅基固废的处理和回收日益成为焦点。本报告综合探讨了光伏固废中晶硅尾料、金刚线切割废硅粉及废弃光伏组件中硅资源的再利用方法和策略。从高值化、批量化以及绿色化三个角度出发，探讨了固废中高纯硅和高值元素的回收难题，提出了分类回收方法。同时，为应对规模化发展带来的大量固废，本报告强调了大规模、连续化回收技术的重要性，并探讨了经济成本与高效回收的关键技术。关注回收过程中可能存在的二次污染，我们提出了高真空电子束熔炼技术，以实现回收全流程的绿色化。重点探讨了光伏硅基固废中硅资源循环再利用的关键技术，分析了高纯硅、高值金属元素的绿色、批量化回收手段。通过系统的回收和再利用，不仅能减少固废对环境的污染，还能有效节约资源，降低光伏发电成本。展望未来，技术的进步和回收体系的完善将为光伏产业的可持续发展带来新的动力。

B04-11**Enhanced interactions between NiFe-LDH Nanosheets and Monolayer rGO for Efficient Overall Water**

Splitting

李芳菲

吉林大学

摘要内容暂未收到

B04-12**煤矸石基氟离子吸附剂的制备及吸附机制研究**

牛继南*、孙力

中国矿业大学

煤矸石是我国目前年排放量以及累计存量最大的工业废弃物之一，带来了严重的安全、环境隐患与资源浪费；同时，随着半导体、光伏产业的发展，含氟工业废水排放量急剧增加，已成为部分地区典型的工业污染物。在低浓度含氟废水处理中，吸附法具有工艺简单、操作方便等优点。本工作中，通过共沉淀法将勃姆石负载在煤矸石表面，并进一步研究了复合吸附剂在不同 pH、剂量、共存阴离子、时间和温度等环境条件下的除氟性能，考察了煤矸石中重金属离子 Pb 的环境影响，并通过动力学、热力学分析和材料吸附前后的表征揭示出煤矸石-勃姆石的氟离子吸附机理。结果表明，pH=8 条件下负载的氧化铝晶型为勃姆石；复合样品在 pH=3 时除氟性能最好，且吸附选择性优良；在整个吸附过程中活性位点吸附是主要决速步骤，而在扩散步骤中的外扩散是主要决速步骤。该研究为煤矸石的资源化利用和氟污染治理提供了一个解决思路。

B04-13**类质同像置换对坡缕石结构和应用性能的影响**吴丽梅¹、吕国诚*²、廖立兵²、唐宁¹、王晴¹

1. 沈阳建筑大学

2. 中国地质大学（北京）

坡缕石是一种含水镁铝硅酸盐黏土矿物，具有独特的链层状晶体结构。坡缕石八面体中阳离子类质同像置换是影响其化学组成以及物理化学性质变化的主要原因之一。本文采用 X 射线衍射数据进行 Rietveld 细化，构建了不同程度类质同像置换的坡缕石晶体结构模型。结合多种谱学手段分析不同类质同像置换坡缕石的晶体结构、棒晶尺寸和扭曲形态、棒晶间的相互作用和解离分散性能。研究发现， $Mg^{2+}/R^{3+}>1$ 的坡缕石属于斜方晶系，表现为双三八面体结构； $Mg^{2+}/R^{3+}<1$ 的坡缕石属于单斜晶系，M1 位置出现空位，并且随着八面体中 R^{3+} 置换 Mg^{2+} 量的增多，空位增多，甚至出现连续空位，使坡缕石结晶度和结构稳定性降低。类质同像置换导致坡缕石八面体结构中空位数量增多，还会使表面残缺价键、断键增多，影响表面酸碱度和零电点，改变坡缕石表面电荷分布特征。因此，八面体类质同像置换影响坡缕石微结构特征和表-界面性质，微结构和表-界面性质又影响坡缕石棒晶形态和解离分散性，使其在胶体、催化、吸附等众多应用领域表现出明显的性能差异。通过本研究，有助于更好的理解坡缕石的结构特征和其应用性能之间的构效关系，这对坡缕石的晶体结构演化研究和高效利用具有关键意义。

B04-14**工业氧化铝的含量对 MgO-MgAl₂O₄ 陶瓷材料致密性和力学性能的影响**

王晓军

吕梁学院

本文通过向菱镁矿中添加 0-20 wt% 的工业氧化铝，采用固相烧结工艺在 1450-1550 °C 保温 2 h 后获得了 Al₂O₃-MgAl₂O₄ 复合耐高温材料。研究了工业氧化铝含量对材料的烧结行为的影响，揭示了 MgO-MgAl₂O₄ 陶瓷材料烧结过程中的离子互扩散机理。研究发现：经 1500 °C 烧结 2 h 后的添加量为 15 wt%

的样品综合性能较好，此时样品的体积密度为 3.34 g/cm³、显气孔率为 1.87%、抗折强度为 126.31 MPa。

B04-15

基于工业原料制备低钙固碳水泥熟料的试验研究

张云子*

北京工业大学

低钙固碳胶凝材料指利用低钙硅酸钙矿物的碳化特性，在通入 CO₂ 的养护条件下硬化得到一定强度的材料，能够在部分应用范围内替代普通硅酸盐水泥，以缓解水泥生产工业对环境的不利影响，具有低碳、节能的特点。本研究探索使用石灰石和砂岩等工业原料，基于 C₂S-C₃S₂ 的低钙熟料体系，制备以 γ -C₂S、 β -C₂S 和 C₃S₂ 为主要矿物的水泥熟料，并研究其碳化性能。结果表明，在 1300°C 下能够烧成以 γ -C₂S 和 β -C₂S 为主，伴有少量 C₃S₂ 的低钙熟料，其自粉化性能良好，24h 的碳化强度能够达到 138MPa 以上。通过碳化活性以及对碳化产物的分析，方解石的生成是低钙固碳材料的主要强度来源。且经研究发现，熟料中镁硅钙石矿物的生成能够促进 Ca²⁺ 的溶出，加速碳化反应的进行，在一定程度上提高了固碳材料的力学性能。

B04-16

电石渣捕集水泥窑烟气中的 CO₂ 及其吸收效率改性研究

陈泽升*

北京工业大学

电石渣作为工业废弃物，因含有大量活性 CaO 和 Al₂O₃、MgO 等惰性物质来提高抗烧结性能，而可以有效的替代天然矿石作为钙基吸附剂。但是存在随钙循环次数增加，CO₂ 吸收率骤降的现象。本文以电石渣为钙源，采用柠檬酸、氢氧化钾改性，制备高效稳定的钙基吸附剂。在固定床反应器中探究 CO₂ 吸收效率性能的影响，以及最佳工艺条件。结果表明，碳酸化温度为 700°C，时间为 30min，煅烧温度为 900°C，30min 吸收效率最好，用柠檬酸改性的电石渣第一次碳酸化转化率高达 95.23%，氢氧化钾改性的电石渣第一次碳酸化转化率为 80.53%，都高于电石渣的 72.28%，并且十次钙循环后仍保持较好的碳酸化转化率。

B04-17

富含粘土矿物-洗砂尾泥基地聚合物微观结构及力学性能优化

陈伟杰、王琰帅*、董必钦

深圳大学

洗砂尾泥(SWS)作为洗砂过程的副产物，浆体中含有丰富的粘土矿物，是一种潜在的地聚合物前驱物。本研究考察了 SWS 煅烧温度和碱性溶液 SiO₂/Na₂O 比对 SWS 基地聚合物微观结构和力学性能的影响。分析结果表明，在 550°C 的煅烧温度下，SWS 中部分粘土矿物由晶态向非晶态转变，引起非晶态 Si 和 Al 的含量增加，从而增强了它们的碱活性。但由于该煅烧温度下样品中还残留大量未活化的粘土矿物，导致形成的地聚合物结构松散，抗压强度较低。与 550°C 处理后的地聚合物相比，650 ~ 750°C 温度下生产的地聚合物具有更致密的微观结构和更高的抗压强度。性能的提高是由于更多的粘土矿物发生去羟基化反应，产生更多的非晶 Si 和 Al 并参与聚合反应。然而，当煅烧温度达到 850°C 时，由于非晶相中 Si 和 Al 的活性降低，和比表面积的减少，导致形成的地聚合物的微观结构变得松散，抗压强度低。

在 750°C 的煅烧温度下，SiO₂/Na₂O 比为 0.8 和 1.4 的地聚合物中无定形含量分别为 62.4% 和 64.5%，而 SiO₂/Na₂O 比为 2 的地聚合物中无定形含量为 54.5%。SiO₂/Na₂O 为 1.4 时，地聚合物的微观结构更致密，抗压强度更高，说明该比例的碱性溶液促进了非晶态物质的形成，提高了地聚合物的强度。以上结果表明，经过 750°C 煅烧后的 SWS 能改善 SWS 基地聚合物的微观结构和力学性能，同时，碱性溶液中适当的 SiO₂/Na₂O 比例有利于促进地聚合物的聚合。

B04-18**热爆法结合化学/电化学脱合金快速制备形态可控的纳米花状 $\text{Co}_3\text{O}_4(\text{OV})$ 用于超电自支撑电极**商智超^{1,2}、张嫚³、冯培忠*¹

1. 中国矿业大学
2. 新南威尔士大学
3. 台州学院

通过快速热爆(TE)法制备多孔 CoAl 金属间化合物(IMC)前驱体, 结合化学/电化学脱合金技术制备出具有棒状、纳米花状和蜂窝状纳米结构的 $\text{Co}_3\text{O}_4(\text{OV})$ 自支撑材料。探讨了 IMC 前驱体的相组成、放热行为和微观结构。并研究了各种参数(脱合金时间、温度和外加电压)对样品纳米结构的影响, 最终实现了纳米花 $\text{Co}_3\text{O}_4(\text{OV})$ 纳米结构的可控合成。合成的自支撑 $\text{Co}_3\text{O}_4(\text{OV})$ 材料具有较高的氧空位浓度和比表面积($36.69 \text{ m}^2/\text{g}$), 具有作为超级电容器电极材料的潜在应用前景。所合成材料表现出较高比电容(电流密度为 $10 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 时为 $11.25 \text{ F}/\text{cm}^2$)和优异的循环稳定性(在电流密度为 $20 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 循环 2000 次循环后电容保持率为 74.55%)。DFT 模拟表明, 氧空位通过改变电子分布和局部电荷密度能够明显影响金属原子在材料表面的吸附行为。并且氧空位可以促使局部电子结构重组, 将带隙缩小至 0.70 eV 。这种重组将材料的吸附能降至 -4.41 eV 。

B04-19**赤泥等工业固废全组分协同利用研究与实践**

刘晓明

北京科技大学

摘要内容暂未收到

B04-20**大型复杂镁合金构件砂型铸造燃爆控制机理研究**

张伦勇*

哈尔滨工业大学

摘要内容暂未收到

B04-21**膨润土在新型吸附/催化材料构建中的关键效应**

张寒冰

广西大学资源环境与材料学院

摘要内容暂未收到

B04-22**玄武岩地质聚合物矿物胶凝材料的制备及力学性能优化研究**

高欢*、雷圣均、汪灵

成都理工大学

地质聚合物是由硅铝质原料在碱激发剂作用下形成的 $[\text{SiO}_4]$ 和 $[\text{AlO}_4]$ 等单体, 通过聚合反应形成的一种具有三维交联结构的聚铝硅酸盐材料, 是一种绿色环保的无机矿物胶凝材料。地质聚合物综合性能优良、性价比高, 是硅酸盐水泥的理想替代材料。玄武岩是由基性岩浆通过裂隙式喷发后快冷形成的一种硅铝质岩石, 是地球上分布最广泛的岩石类型之一, 可作为地质聚合物矿物胶凝材料的潜在硅铝质原料。本工作以玄武岩为对象, 通过碱激发和微波养护的方式制备了地质聚合物胶凝材料, 并研究了煅烧工艺对玄武岩原料碱激发反应活性和地质聚合物力学性能的影响。主要结果如下:

(1) 原料配比对地质聚合物性能的影响：随着碱激发剂浓度和固液比增加，样品的抗压强度随之降低；随着废弃玻璃粉添加量增大，样品的抗压强度随之增大。优化后的原料配比为：NaOH 溶液浓度为 3 mol/L，添加量为 35 wt%。在潮湿环境下室温养护 28 天，玄武岩地质聚合物抗压强度为 7.1 MPa，而经过 180 W 微波养护 15 分钟，样品的抗压强度为 7.4 MPa，与室温养护 28 天的地质聚合物抗压强度相当。

(2) 煅烧温度对玄武岩原料碱激发反应活性的影响：随着煅烧温度从 25°C 升高至 1000°C，玄武岩原料的聚合度先降低后升高。在 750°C 时，玄武岩原料的碱激发反应活性达到最高。利用不同煅烧温度下玄武岩粉制备的玄武岩地质聚合物，其抗压强度在 750°C 时略有增加（抗压强度 > 7 MPa，孔隙率为 30%），表明采用原料煅烧的方式对玄武岩地质聚合物力学性能的优化效果有限。

(3) 煅烧工艺对玄武岩地质聚合物力学性能的影响：随着煅烧温度升高至 1000°C，玄武岩地质聚合物的抗压强度先升高后降低，而保温时间对其力学性能几乎无影响。在煅烧温度为 750°C，保温 30 分钟条件下，样品的抗压强度可达 9.77 MPa。当玻璃粉的添加量增加至 10% 时，经过煅烧的地质聚合物的抗压强度从 6.21 MPa 提升至 16.59 MPa，力学性能优化效果显著。

B04-23

CO₂ 钢渣泡沫混凝土制备及性能研究

宋俊甫*

北京工业大学

泡沫混凝土 (FC) 作为一种常见的保温材料，主要以水泥和工业固废为原料，因此在处理工业固废方面展现出优秀的能力，然而为了降低成本，消纳固废，利用钢渣制备的泡沫混凝土存在强度降低、吸水率高、保温性能差等问题。

本课题在 CO₂ 气氛下通过物理发泡法制备 CO₂ 泡沫，从而将 CO₂ 气体引入 FC 内部，使 CO₂ 均匀分布于 FC 气孔结构中，制备泡沫混凝土。探索 CO₂ 对钢渣泡沫混凝土力学性能和保温性能的影响，比较不同钢渣掺量和不同水灰比对钢渣泡沫混凝土性能的影响，确定最佳的原料配合比。并研究钢渣泡沫混凝土的固碳能力，实现二氧化碳的资源化利用。

B04-24

低碳电催化应用中的反应活性调控机制和界面传质效应理论模拟

白沛瑶、徐朗*、魏仕林、任怡鸣、王红光、刘伟琪、杨闯闯

中国矿业大学

自工业革命以来，信息革命、人工智能革命接踵而至，带动人类物质和信息社会蓬勃发展的同时，也导致了不断增长的对能源巨大的需求缺口和对环境的压力。结合我国“碳达峰、碳中和”的长期战略发展需要，大力发展新型绿色低碳能源方式是目前重要的课题之一。低碳电催化是指在一系列重要的新型低碳能源存储与转化装置中的基本反应，这些电化学反应可用于燃料电池、金属-空气电池、二氧化碳电还原装置等应用。上述电催化反应通常发生在电极材料的多相界面上，因此，对电催化过程的反应活性调控机制和界面传质效应的研究极为重要。然而，由于现有技术手段的局限性，仅仅通过实验方法无法深入完整地揭示催化环境中的各种微/介观性质。随着计算模拟方法学和算力的日益发展，理论模拟成为揭示上述科学问题的有力方式。本摘要中，介绍了对一系列低碳电催化应用（电催化氧还原反应、电催化二氧化碳还原反应、电催化氮还原合成氨反应和燃料电池器件）的理论方法模拟，通过第一性原理计算、从头算分子动力学和有限元模拟方法，探究了反应（器）中的多种活性调控机制和界面传质效应，并提出了相应的活性位点调控工程和界面传质能力优化策略，为低碳电催化应用研究奠定了理论基础。

B04-25

利用电石渣进行赤泥脱碱研究

丁思哲*

北京工业大学

赤泥是制铝工业提取氧化铝时排出的工业固体废弃物，赤泥中高的碱含量限制其利用。利用化工废渣电石渣替代天然钙基材料进行赤泥脱碱，分析脱碱温度、电石渣掺量、液固比、反应时间四个因素对脱碱效果影响，探究电石渣进行赤泥脱碱的反应机理。结果表明，随着温度升高，电石渣掺量增加，反应时间增加，脱碱效率升高；在温度 90 °C，液固比 4: 1，反应时间 360 min，赤泥与电石渣的质量比为 1: 1 的反应条件下，脱碱效率达到 81%，脱碱后赤泥中的 Na₂O 含量不大于 1%，满足水泥原料的要求。电石渣进行赤泥脱碱反应符合内扩散未反应收缩核模型，提高反应温度与反应物的量均可提高脱碱率。

B04-26**退役锂离子电池正极材料农业废弃物还原-弱酸浸出回收研究**

李佳峰*

中国矿业大学

本研究利用农业废弃物对退役锂离子电池正极材料中有价金属进行回收。材料样品为电池正负极混合物，锂、镍、钴和锰的含量分别为 2.83%、9.36%、5.98%和 26.10%，粒度在 1~100 μm 范围占比 94%。农业废弃物经硫酸高温水解，高分子纤维素分解为单糖。浸出实验表明：样品中有价金属直接酸浸率<15%，当水解液添加量为 200 mL/L、pH 为 1~2 时，四种有价金属浸出率均>97%。它们的平均浸出率与酸耗量、重量损失率呈正相关关系，相关系数分别为 0.9798 和 0.9983。X 射线衍射和扫描电镜分析显示金属浸出率较高时，石墨谱峰的强度明显超过了金属氧化物主峰，浸渣呈现疏松稀松的状态。X 射线光电子能谱结果显示原始样品中原始样品中 Ni 元素以+2 和+3 价存在，占比分别为 67%和 33%，Co 元素以+3 和+4 价存在，占比分别为 70%和 30%，Mn 全部以+4 价存在。样品经稻壳水解液处理后，有价元素均被还原为+2 价，酸浸出后以离子形式进入溶液，残留的少量金属元素仍以+2 价存在。本研究在利用农业废弃物的同时，实现了退役锂电池正极材料中有价金属的回收，为电池材料高效清洁循环利用提供基础和指导。

B04-27**海工水泥抗蚀性的调控方法**

郭轩铭*

北京工业大学材料科学与工程学院

为实现“海洋强国”战略，我国大力发展海洋工程，海洋工程耐久问题凸显。由于不同地域的海洋环境不同所导致的海水侵蚀能力不同，对海工水泥的地缘适应性提出了更高的要求。海洋工程用水泥的抗蚀性提升主要通过掺加掺合料对水泥进行复配，改善原料颗粒级配，调整各种水化产物的生成量，增加密实度。因此提出利用原料硫铝比调控海工水泥抗蚀性，通过调控硫铝比实现海工水泥抗蚀能力和水泥耐久性的平衡可控性。其主要原理为利用硫铝比控制初次钙矾石的生成量，进而影响海工水泥在实际应用的腐蚀环境中的二次钙矾石生成量，增加密实度从而减少腐蚀性离子在水泥基体内的扩散，硫铝比的改变进而影响水化产物的形成，从而对耐久性也有调控作用。

B04-28**通过 LCA 评估工程渣土制备低碳地聚物的研究：探索合成参数对其性能的影响**

袁炳祥、梁靖康、张佰发*

广东工业大学

建筑行业对水泥的过度依赖导致了严重的环境问题。随着全球低碳和可持续发展目标的推进，迫切需要寻找可以替代水泥的建筑材料。在此背景下，回收工程渣土制备低碳的地聚物的研究得到了广泛的关注。本研究以华南地区基坑工程产生的工程渣土为原料，通过预处理等方法活化工程渣土的特性，制备低碳的

地聚物。研究重点探讨合成参数,包括 $\text{SiO}_2/\text{Na}_2\text{O}$ 比和液固比,对碱活化工程渣土地聚物性能的影响。通过维卡仪和万能电子试验机测试地聚物的凝固时间和抗压强度,通过 X 射线衍射 (XRD) 和傅里叶变换红外光谱 (FTIR) 表征地聚物的矿物学特征,采用扫描电镜 (SEM)、压泵法 (MIP) 和热重分析 (TG) 表征地聚物的微观结构。研究表明:经过 7 天的养护时间,当 $\text{SiO}_2/\text{Na}_2\text{O}$ 比为 1.5 时,地聚物的抗压强度最高,达到 40MPa。该 $\text{SiO}_2/\text{Na}_2\text{O}$ 比制备的地聚物具有最小的孔隙和最少的裂缝,能够减少水分蒸发,表现出卓越的热稳定性。此外,提高液固比能够细化地聚物的孔隙结构,从而提升其力学性能,但是这会增多碳酸盐的形成,导致地聚物在高温下产生更大的质量损失。本研究还采用了生命周期评估 (LCA) 方法,对比工程渣土制备地聚物和传统水泥混凝土对环境产生的影响,研究的类型包括全球变暖和酸化。LCA 表明,与混凝土相比,工程渣土制备的地聚物在减少 CO_2 和 SO_2 的排放方面具有显著优势。减少了 4%至 26%和 8%至 19%。综上所述,本研究通过碱活化技术,将工程渣土转化低碳的地聚物材料,提高固废资源的利用率,推动我国的低碳经济发展。

B04-29

冶金固废协同制备快硬早强修复加固材料原理与技术

张增起

北京科技大学

摘要内容暂未收到

B04-30

一种新型仿翡翠微晶玻璃功能材料的研发与应用

陶隆凤*

河北地质大学宝石与材料学院

传统建筑装饰材料如石材、陶瓷、瓷砖等,虽历史深厚且应用普遍,但色泽不均、耐磨性差、韧性和抗腐蚀性不足等问题已制约其应用广度。仿翡翠微晶玻璃与天然的翡翠成分相似,是一种特殊的硅酸盐微晶玻璃材料,一般通过控制合适玻璃的结晶而制备,由大量的细颗粒和残留玻璃组成。

本文旨在一种仿翡翠微晶玻璃材料进行系统的探究,并探讨了其潜在的应用价值;以软玉弃矿、粉煤灰、铬铁渣等固废为原料,采用熔融法将原料加热到 1500°C 保温 2h,取出熔融体倒入铁制模具中,然后在 600°C 中退火 2h,获得母相玻璃。并采用红外光谱与原位拉曼光谱相结合的测试技术,探讨了其结构和谱学特征,结果表明:根据基础玻璃与仿翡翠微晶玻璃的玻璃网络结构的解聚程度 (DOP) 值显示,添加 2%的 Cr_2O_3 时,析晶效果最好;仿翡翠微晶玻璃在 750°C 时开始形核, 850°C 为最佳形核温度, 900°C 时晶核熔化,析晶能力下降。本研究揭示了结晶过程中 Cr_2O_3 添加量与温度对结晶的影响,为多源尾矿协同制备仿翡翠微晶玻璃研究提供实验数据与研究方法。

B04-31

单原子 Fe/氮缺陷 g-C₃N₄/高岭石复合材料的应用研究

张祥伟*

中国科学院广州地球化学研究所

近年来,单原子催化剂因其独特的结构、超高的原子利用率以及较高的量子效率在光催化 (Vis) 和过硫酸盐氧化 (PMS) 协同降解污染物领域得到了广泛的关注,而缺陷型 g-C₃N₄/高岭石因其稳定的物化性质以及良好的配位环境成为了单原子催化剂的良好载体。本研究基于局域电荷密度调节策略,采用简单的化学吸附-煅烧法成功将单原子 Fe 锚定至氮缺陷 g-C₃N₄/高岭石复合材料表面 (FeSA-NGK)。结果表明,单原子 Fe 的负载量高达 2.57 wt%, Fe 原子可以与氮缺陷之外的五个氮原子形成稳定的 Fe-N₅ 位点。一方面,氮缺陷的引入提升了 Fe 原子的电荷密度,有助于构建由周围 N 原子向单原子 Fe 中心转移的电子通道,提升单原子催化剂的光催化和 PMS 活化性能;另一方面,高岭石载体的助分散效应将单原子 Fe 的负载量提升了 14.2%,为催化反应提供了更多反应活性位点。同时其表面羟基结构也加速了 PMS 的分解反应,使

得复合材料对双酚 A (BPA) 的降解率和 PMS 消耗率分别提升了 22.8% 和 6.6%。降解实验结果证明 FeSA-NGK/Vis/PMS 体系在 10 min 内对 BPA 的降解率可以达到 97.5%，且呈现出两阶段反应过程，分别是以 PMS 活化过程为主导的快速氧化过程和以光催化为主导的慢速氧化过程。 $1O_2$ 、 $\bullet O_2^-$ 、 $SO_4^{\bullet -}$ 、 $\bullet OH$ 和 h^+ 共同作用，实现了 BPA 的有效矿化和降解，其中 $1O_2$ 作为主要的活性物种主导了催化降解反应。

B04-32

转炉渣碳热还原高效回收铁

黄兰^{1,2,3}、张芳^{1,2,3}、彭军^{1,2,3}、陈宇昕^{1,2,3}、柴铁凡^{1,2,3}、安胜利*^{1,2,3}

1. 内蒙古科技大学稀土产业学院，包头 014010
2. 内蒙古先进陶瓷材料与器件重点实验室（内蒙古科技大学），包头 014010
3. 轻稀土资源绿色提取与高效利用教育部重点实验室（内蒙古科技大学），包头 014010

转炉渣是钢铁冶炼过程中产生的一种具有代表性的固体废物。转炉渣中有价资源的提取和高质化利用是普遍关注的方向。其中，从转炉渣中提取的铁资源可返回作为钢铁冶炼的原料，对转炉渣高质化利用具有重要意义。由于转炉渣自身成分特性，从转炉渣中分离回收铁的研究受到业界关注。本研究设计了一种通过碳热还原从转炉渣中回收铁的绿色高效工艺。研究表明，高炉渣与转炉渣质量比 3:7、还原温度 1600 °C、还原时间 60 min 的条件下，铁和磷的还原率分别达到 98.34% 和 98.67%。结合 TG-DSC 和 SEM-EDS 分析，详细研究了铁的还原机制和还原过程的动力学。最后，对还原渣进行了简单筛选，铁的回收率为 95.47%，品位为 77%。该工艺为转炉渣的高效综合利用提供了一条可行性思路。

B04-33

离子吸附型稀土尾矿用于石灰石煅烧粘土水泥的制备和性能调控研究

彭志能、袁鹏*、张佰发、玉婷

广东工业大学

离子吸附型稀土尾矿 (RET) 是离子吸附型稀土矿山开采过程中产生的副产品。长期堆存于地表的 RET 不仅占据了大量的土地资源，更因其容易迁移的浸出物 (如 NH_4^+ 和 SO_4^{2-}) 及潜在的重金属离子 (如 Cd^{2+} 、 Pb^{2+} 和 Cu^{2+}) 对周边的土壤和水体带来了严重污染，对人类健康造成威胁。然而，浸出后的尾矿与稀土原矿的矿物性质没有太大差别，富含如高岭石、埃洛石等粘土矿物，且活性相对石英、长石较高，经过焙烧活化后可以作为一种辅助胶凝材料 (SCMs)。因此，在“双碳”目标的大背景下，亟待探究如何利用 RET 富含粘土矿物的特性，将其作为 SCMs 进行新型低碳水泥基材料的制备。

石灰石煅烧粘土水泥 (LC3) 被看做是具有全球范围内广泛替代传统硅酸盐水泥的低碳材料。鉴于此，本研究旨在探索 RET750 作为 SCMs 运用于 LC3 制备的可行性。通过材料表征和力学性能测试，确定了 RET750 在 LC3 中的适宜掺量为 20 wt%，制备得到的 RET20 试块具备了良好的 28 天龄期抗压性能 (36.81 MPa)。为了进一步提升早期强度，满足实际工业需求，本研究进一步引入偏高岭土 (MK) 进行 RET20 的性能调控。通过优化 RET750 与 MK 的配比，制备了优异的 R12M8 试块。该试块在早期龄期 (3 天、7 天) 和 28 天龄期抗压强度分别达到 25.9 MPa、40.4 MPa 和 58.3 MPa，较 RET20 分别提升了 369.2%、264.0% 和 55.2%，力学性能改善显著。研究结果表明，合理调控 RET750 与 MK 的配比不仅能加速 LC3 的水化反应进程，还能通过增加 C-(A)-S-H 的形成和减少可溶性 CH 的含量来改善材料的微观结构和强度性能，从而提高 LC3 的整体性能。通过此研究，分析了离子吸附型稀土尾矿各组分在制备 LC3 过程发挥的作用，进而填补其在 LC3 生产领域的空缺，进一步实现对离子吸附型稀土尾矿的绿色处理和资源化再利用。

B04-34

天然矿物纳米限域空间内物质输运特性研究

王丽丽

中国科学技术大学苏州高等研究院

摘要内容暂未收到

B04-35

基于自发分解反应的自充电铝离子电池研究

刘梦

中国地质大学（北京）

谢弗雷尔相是能源储存领域研究的热点材料。其结构单元在三维空间组成的特殊通道有利于高价阳离子在结构中的嵌入脱出，对谢弗雷尔相结构中的阴离子进行调控，可进一步调节结构对阳离子的限域作用。因此，基于谢弗雷尔相具有优异的电化学储能性质，探究谢弗雷尔相成分、结构与电化学性能之间的构效关系有待进一步完善。

本工作研究了不同成分结构的谢弗雷尔相在铝离子电池中的应用，探究了谢弗雷尔相材料成分，结构与电化学储能性能之间的关系，拟为谢弗雷尔相在能源储存中的应用提供理论依据。主要研究结果如下：

(1) 采用高温固相法及高温热冲击法制备了 Mo_6S_8 材料，研究了不同方法合成 Mo_6S_8 材料的结构、形貌、价态等物理化学性质，及其作为铝离子电池正极材料的性能，结果表明，在恒电流充放电模式下， Mo_6S_8 在铝离子电池中具有较高的可逆比容量和循环稳定性。

(2) 探究了 Mo_6S_8 在铝离子电池体系中的自充电性能，该体系在放电后可通过静置回升至开路电压。研究发现，该体系在消耗负极的同时， $\text{Al}_{1/3}\text{Mo}_6\text{S}_8$ 可通过自身自发的歧化反应分解为 Al 及 Mo_6S_8 进而实现自充电。设计了小型的流动型电池，为其实际应用提供了设计思路。

(3) 对谢弗雷尔相进行阴离子调控，并将其作为铝离子电池正极材料。研究发现， Mo_6Se_8 作为铝离子电池正极材料具有较高的可逆性和较小的电压滞后。采用 Se 和 Te 部分替代 Mo_6S_8 中的 S 后，相较于 Mo_6S_8 ，其可逆比容量变低。Se、Te 取代后对 Mo_6S_8 的自充电性能有显著影响，电压回升时间缩短，容量减小。

B04-36

不连续加热对硅酸盐水泥熟料烧成的影响

王泽琳*

北京工业大学

我国水泥工业是典型的能源密集型行业之一，其生产过程需要消耗大量的化石燃料。化石燃料在燃烧分解时会产生大量 CO_2 。为了响应国家节能减排任务的发展，可以在熟料煅烧过程中通过增加电能、太阳能、风能等各类清洁能源的有效供给来减少化石燃料的使用。本研究依托《太阳能高倍柔性聚光制备水泥熟料与陶瓷关键基础问题研究》项目开展，利用高温马弗炉进行不连续加热，模拟多云、阴天、夜晚等天气限制以及设备故障等情况带给太阳能煅烧水泥熟料的影响，为后续提出聚光直接制备水泥熟料系统工艺参数及水泥熟料连续运行模式和精确调控机制，实现其连续运行提供数据支撑。

B04-37

光催化材料表面活性位点的构建及性能研究

于雪莲*

中国地质大学（北京）

催化剂缺陷的存在不仅影响表面位点与反应物间的吸附配位作用，电子局域态的改变更与微界面电荷转移过程密切相关，从而为调控光催化反应速率和选择性提供有效途径。以 C_3N_4 光催化固氮反应为例，通过将缺电子的硼（B）插入氮化碳中，构造了受阻的路易斯酸碱对（FLPs），利用其“推拉”效应将 N_2 活化并高效还原为 NH_3 （图 a, b），为合理设计光固氮催化剂提供了新的途径。FLPs 策略在活化 CO_2 及转化方面也具有重要的应用，如图 c-e 所示，受阻路易斯酸碱对作用显著加速了 CO_2 的活化，使光催化 CO_2 还原为 CO 的效率得到显著提升，同位素（ $^{13}\text{CO}_2$ ）示踪剂证实还原产物来自于 CO_2 源。进一步将缺陷态 C_3N_4 与二维共价有机骨架 COF 结合构筑了 2D/2D 结构的范德华异质结，得益于界面处高效的电荷转移，

使得 VN-C3N4-COF 异质结表现出优异的光还原 CO₂ 性能 (图 f), 为新型 CO₂ 还原光催化剂的开发提供了新思路和新方法。

参考文献

- 1.Xuelian Yu, Xiaoqiang An, Jinhua Ye*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, e202302050.
- 2.Jiangpeng Wang, Xuelian Yu*, Jinhua Ye*, *Appl. Catal. B: Environ* 2022, 301, 120814.
- 3.Jinyu Qiu, Xuelian Yu*, Xiaoqiang An, Guocheng Lv, *J. Mater. Chem. A* 2023, 11, 4572.
- 4.Tao Wang, Xuelian Yu*, Xiaoqiang An, *Appl. Catal. B-Environ* 2020, 264, 118527.
- 5.Xuelian Yu*, Li-Min Liu, Jinhua Ye, Andreu Cabot, *Chem. Mater.* 2020, 32, 2774.

B04-38

花岗岩残积土的改良：碱溶液/水泥的协同作用与机理

张佰发^{*1,2}、袁鹏¹、袁炳祥²

1. 广东工业大学环境科学与工程学院
2. 广东工业大学土木与交通工程学院

花岗岩残积土广泛分布在我国南方的沿海地区, 富含大量的粘土矿物(如高岭石、伊利石、蒙脱石等)、石英和长石等矿物。在干燥条件下, 此类残积土具有高强度的承载能力, 但在遇水后浸泡或受到水循环冲刷后容易发生滑坡、崩塌等地质灾害。

本研究主要以广州某地铁基坑开挖的废弃花岗岩残积土为研究对象, 提出了利用碱溶液-纤维改良此类残积土的静、动态力学性能, 并通过协同水泥提高改良效果。研究表明, 加入碱溶液和纤维后, 残积土的静、动态强度都能得到提升, 其中, 当碱溶液的 SiO₂/Na₂O 比为 0.5 时, 其静、动态强度提升幅度最大, 分别提高了 441.2%和 589.7%。这是由于碱溶液能够消耗残积土中的粘土矿物, 形成了 N-A-S-H 凝胶, 填充土颗粒孔隙之间, 降低残积土的孔隙率; 此外, 纤维能起桥接作用, 加强土颗粒之间的连接, 从而提高了残积土的力学性能。

在该体系中加入 2%的水泥后, 残积土的性能得到进一步提升, 与未经处理的残积土相比, 残积土的静态抗压强度提高了 516%; 这是由于 N-A-S-H 与水泥水化形成的有 C-(A)-S-H 凝胶发生耦合作用, 填充更多的孔隙, 形成更致密的结构, 从而提高残积土的力学性能。值得注意的是, 水泥掺入量含量多, 或碱性溶液中 SiO₂/Na₂O 比高等条件下, 都会产生过高的碱性环境, 破坏 C-(A)-S-H 凝胶、N-A-S-H 凝胶的形成, 导致改良残积土的基体被破坏, 从而导致静、动强度下降。

本研究成果能够为花岗岩残积土改良加固以及工程应用改良提供有效的参考, 也为废弃残积土质的利用提供参考。

B04-39

基于金属掺杂与缺陷工程协同作用的吸附材料在铀矿冶废水处理中的高效应用

高源

中国矿业大学

摘要内容暂未收到

B04-40

Utilization of Iron Tailings in Limestone Calcined Clay Cement (LC3) for Sustainable Construction

Muhammad Faheem*, Ting Yu, Baifa Zhang, Zhineng Peng, Peng Yuan

Guandong university of technology

Significant environmental challenges are posed by the improper disposal and management of iron tailings (ITs), including hazardous waste leaching and extensive land use. This study explores a sustainable strategy by integrating ITs as supplementary cementitious materials in limestone calcined clay cements (LC3), thereby

establishing a quaternary cement system with a compressive strength equivalent to that of reference ordinary Portland cement (OPC). The research systematically investigated the impact of substituting different proportions of ITs into LC3 and the influence of varying gypsum content on LC3 integrated with ITs. The investigation involved the evaluation of compressive strength, microstructural characterization via Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and scanning electron microscopy (SEM), and the analysis of leaching behavior in two extractant solutions, acetic acid and deionized water. The findings demonstrated that substituting 28% of LC3 with ITs resulted in a compressive strength of 42 MPa after 28 days of curing, equivalent to the reference OPC, and facilitated a 50% reduction in OPC content. The microstructural analyses indicated that the ITs, in addition to providing a filler effect, participated in the chemical reactions to form additional calcium-aluminate-silicate-hydrates (C-(A)-S-H) gel, which is essential for the structural integrity of the cement matrix. The study also revealed that while gypsum had a positive impact on early strength development, it reduced the compressive strength at 28 days. Moreover, the concentrations of Zn (0.003-0.094 mg/L), Pb (0.002-0.090 mg/L), Cu (0.005-0.018 mg/L), Mn (0.115-0.712 mg/L), Ni (0.011-0.021 mg/L) in the leachates of the cementitious products were below the critical limits for surface water and groundwater. These findings suggest that the substitution of ITs in LC3 to develop a quaternary cement system is a promising approach for the resourceful utilization of these wastes and the mitigation of associated pollution.”

B04-41

The Potential of Halloysite, Metakaolin, and Biologically Self-healing Concrete for Artificial Coral Reef Restoration

Mohammad Fahimizadeh*¹, Febrienne Sukiato², Kok Lynn Chew^{2,3}, Pooria Pasbakhsh⁴, Joash Ban Lee Tan⁵, Peng Yuan¹, Affendi Yang Amri², Raman R. K. Singh⁶

1. School of Environmental Science and Engineering, Guangdong University of Technology
2. Institute of Ocean and Earth Sciences (IOES), Universiti Malaya, 50603 Kuala Lumpur, Wilayah, Kuala Lumpur, Malaysia
3. Coralku Solutions, 60000 Kuala Lumpur, 60000 Wilayah Kuala Lumpur, Malaysia
4. Centre of Recovered Resources, Department of Infrastructure Engineering, The University of Melbourne, Melbourne, Australia
5. School of Science, Monash University Malaysia, Jalan Lagoon Selatan, Bandar Sunway, 47500 Subang Jaya, Malaysia
6. Department of Chemical Engineering, Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Monash University, Clayton 3168, Australia

In recent decades, global coral reef cover has progressively declined due to anthropogenic factors such as pollution, unsustainable coastal development, destructive fishing practices, and, most importantly, climate change due to global warming, which has been identified as the main cause of the decline of coral reefs worldwide. Various coral restoration efforts have been taken to assist in the recovery of degraded reefs. An estimated 21% of coral restoration projects worldwide deploy artificial reef structures to increase habitat for marine life and fisheries production of coral reefs, provide coastal recreational activities (i.e., SCUBA diving), prevent destructive fishing activities, and provide an area for coral larvae to settle and thrive. Artificial reef structures are commonly fabricated using standard construction materials like cement and steel bars. Such materials are widely available and have predictable performance and service life. Novel construction materials and techniques such as nanoclays, hydrogels, and self-healing cement-based materials have shown potential to improve the durability of cement-based structures and enhance their resistance to various stressors. In a pilot study, our research team assessed the impact of metakaolin and different composite microcapsules composed of calcium alginate, halloysite, and biological self-healing agents on the health and attachment of *Dipsastrea* sp. coral fragments

attached to cement paste samples for 9 weeks. The findings showed that the mixture of metakaolin and composite microcapsules could replace up to 25 wt% of cement with no adverse effects on the health and attachment of the coral fragments. The calcium alginate microcapsule containing halloysite and biological self-healing agents might promote coral attachment, while the presence of halloysite was found to improve the structural resistance of the microcapsules to seawater by possibly buffering ion exchange. The findings can serve as a baseline for future studies on materials assessment for artificial coral reef restoration and help advance the research effort for alternative and sustainable reef materials.

B04-42

SUGARCANE BAGASSE ASH UTILIZATION IN CALCINED-CLAY-BASED GEOPOLYMER FOAMS: AN INVESTIGATION ON THERMAL CONDUCTIVITY AND HIGH-TEMPERATURE TREATMENTS

THAMMAROS PANTONGSUK*^{1,2}, DUANGRUDEE CHAYSUWAN³, PAKAMON KITTISAYARM³,
CHAYANEE TIPPAYASAM⁴, DONG LIU^{1,2}, PENG YUAN⁵

1. Guangzhou Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049, China

3. Department of Materials Engineering, Faculty of Engineering, Kasetsart University, Bangkok, 10900, Thailand

4. Department of Welding Engineering Technology, College of Industrial Technology, King Mongkut's University of Technology North Bangkok, Bangkok, 10800, Thailand

5. School of Environmental Science and Engineering, Guangdong University of Technology, Guangzhou, 510006, China

Sugarcane bagasse ash (SCBA) is a residual waste by-product from the sugar industry and is regarded as a pollutant due to the disposal process as it is mostly dumped into open areas, harming the environment. Thailand is one of the biggest sugar producers, resulting in approximately 600,000 tons of SCBA in 2023. SCBA's high silica content (62.2 wt.%) makes it suitable as a pozzolanic additive for environmentally friendly construction materials such as geopolymers. Geopolymers are inorganic polymeric materials with amorphous three-dimensional Si-O-Al structures made from aluminosilicate precursors, such as nanoclays, under alkaline conditions. Geopolymers are appealing because they consume less energy and release less carbon dioxide than ordinary Portland cement during production. Moreover, geopolymer foams can be used for insulation, possess a high thermal resistance, and can be fabricated using a foaming agent to generate a porous structure. In this research, geopolymer foam was developed using SCBA activated by sodium hydroxide and sodium silicate (replacing 10–30 wt.% of nanoclay geopolymer precursors) and hydrogen peroxide as the foaming agent (0–1.5 wt.%). It was found that increasing hydrogen peroxide quantity improved the porosity of the geopolymer foam, while the opposite was observed regarding the SCBA quantity (10–30 wt.%). Higher rates of pozzolanic reactions in the presence of more SCBA producing more reactive silicate during geopolymerization can decrease the hydroxide ions available for reaction with hydrogen peroxide. Hence, relatively less oxygen gas is produced, resulting in lower porosity. A significant reduction of thermal conductivity from 0.3194–0.4519 W/m·K to 0.1532–0.1857 W/m·K was achieved because of increased porosity when hydrogen peroxide levels exceeded 1.0 wt.% with the SCBA amount of 10–20 wt.%. The practical implications of high-temperature resistance were assessed via high-temperature treatment procedures. High-temperature treatments at 600 °C and 800 °C (1 h) led to thermal transformation and the removal of organic residues in SCBA, reducing the pore sizes and increasing the compressive strength of the geopolymer foams. The mixture of 30 wt.% SCBA with 1.0 wt.% hydrogen peroxide demonstrated the highest compressive strength after being heated (23.6 MPa and 21.5 MPa for 600 °C and 800 °C, respectively). The findings can pave the way for efficient SCBA utilization in geopolymer preparation, thereby reducing the environmental impacts of the construction and sugar industries.

B04-43

石墨烯基三维层状双金属氢氧化物的制备及其超级电容器性能

张庆成; 王林江; 许艳旗

广东工业大学

超级电容器是同时具有传统电容器和化学电池优势的一种新型储能器件。而层状双氢氧化物(LDHs)由于其成分和结构可调性等而被认为是一类极具潜力的超级电容器电极材料。但由于层板堆积等因素,导致 LDHs 的实际容量远低于理论容量。除此之外作为一种特殊的氢氧化物,LDHs 较差的导电性能也限制了其电化学性能的释放。目前,从 LDHs 的微观结构与电子结构的调控入手,构建具有优良离子扩散通道和电子转移能力的复合材料是增加 LDHs 材料超级电容器容量的良好途径。

针对 NiV-LDH 的易团聚堆叠、活性位点暴露少的缺点,采用原位共沉淀生长法合成 NiV-LDH 与氧化石墨烯(GO)的复合材料。SEM 显示, NiV-LDH 可以均匀垂直的生长在 GO 两侧,这有效避免了 NiV-LDH 材料的堆积团聚问题,形成以 GO 为骨架,表面生长具有三维开放式交错结构 LDH 的复合材料。该三维开放式的结构有效避免了 LDH 的团聚问题,增强了 LDH 在溶液中的离子转移能力。在此基础上将上述复合材料中的 GO 还原为还原氧化石墨烯(rGO),并获得了 NiV-LDH@rGO 材料。并通过 XPS、XAFS 等手段表征还原前后的电子结构与原子配位环境等的变化,证明了复合材料中氧化石墨烯的还原可以有效增强材料内部的电子转移能力。

B04-44**矿物启发的自还原荧光粉: 结构设计、性能优化与应用前景**

王红玲、梅乐夫*、郭庆丰、廖立兵

中国地质大学(北京)材料科学与技术学院, 矿物材料国家重点实验室, 非金属矿物和固体废物材料利用北京市重点实验室, 北京 100083

天然矿物的结构是漫长地球演化过程中的结晶,为我们提供了基于矿物结构模型、矿物晶体学研究、矿物成分与结构分析筛选设计高性能光学功能材料的灵感。在高品质显示、绿色照明和节能的推动下,自还原荧光粉因其无毒性、结构刚性以及无需外加还原气氛等特性,成为了研究的热点。尽管空气气氛下稀土/过渡金属离子如 Eu^{3+} , Mn^{4+} , Ce^{4+} 的自还原已在特定 XO_4/XO_3 ($\text{X} = \text{Si}, \text{P}, \text{B} \dots$) 阴离子基团结构中实现,但发光机制、效率和可控还原等问题仍是瓶颈。本研究基于矿物结构模型,结合无机晶体学库(ICSD)和第一性原理计算(DFT),筛选出具有稳定晶体场和多面体刚性结构的焦磷酸盐(ABP_2O_7 , $\text{A} = \text{Sr}, \text{Ca}, \text{Ba} \dots$, $\text{B} = \text{Mg}, \text{Zn} \dots$) 基质,为自还原离子提供了理想的配位环境。通过 Rietveld 精修技术,考虑晶格参数、对称性和可能的掺杂位点,运用 XPS、EPR、FT-IR、Raman、UV-vis、PL/PLE 等技术全面表征了材料的结构和性能。研究重点探讨了空位缺陷等自还原影响因素,并通过不等价取代、电荷补偿机理解释了反常的自还原现象。本研究的创新之处在于建立了一个电荷补偿模型,通过 $\text{Li}^+/\text{Na}^+/\text{K}^+$ 等离子体的电荷补偿作用,实现 Eu^{3+} 到 Eu^{2+} 的可控自还原。所开发的自还原荧光粉具有高的量子产率,并在植物生长照明、光学防伪、指纹可视化和丝网印刷等领域展现出广泛的应用潜力。本研究不仅在理论上提出了自还原荧光粉的结构设计原则,而且在实验上基于结构调控、空位缺陷和电荷补偿实现了材料的性能优化,为自还原荧光粉的结构-性能-应用关系提供了新的视角,加深了对自还原机理的认识,为基于矿物开发新型光学功能材料提供了新的思路。

B04-45**Synergistic impregnation of sepiolite by polyethyleneimine and diethanolamine: Enhancing polyamine dispersion and CO₂ capture capacity**

Chenguang Qian*

China University of Mining & Technology, Beijing

Amine-functionalized solid adsorbents exhibit broad development prospects in CO₂ capture from flue gases

due to their high adsorption capacity and selectivity. However, the reported adsorbents are still facing challenges, including high costs, easy agglomeration of polyamines, and limited adsorption temperature ranges. In this study, sepiolite-based composite amine adsorbents are prepared by synergistically impregnating acid-treated sepiolite (HSEP) with a mixture of polyethyleneimine (PEI) and diethanolamine (DEA). The results show that with a PEI/DEA loading ratio of 1:1 and a 60 wt% amine loading, the CO₂ static adsorption capacity of the adsorbent not only increases from 0.58 mmol/g of HSEP to 2.89 mmol/g at 60°C and remains above 2.50 mmol/g after 10 cycles, but also maintains over 2.40 mmol/g within the temperature range of 30~70°C. To simulate industrial flue gases (15 vol% CO₂ and 85 vol% N₂), breakthrough adsorption experiments are conducted, showing an improvement in the dynamic CO₂ adsorption capacity from 0.052 mmol/g of HSEP to 1.60 mmol/g. Furthermore, in-situ DRIFTS analysis reveals that the introduction of DEA into PEI helps the polyamine dispersion, thereby enhancing CO₂ adsorption capacity. The CO₂ capture mechanism follows the zwitterionic reaction, with CO₂ ultimately converting into carbamate and carbamic acid. Overall, the sepiolite-based composite adsorbent, characterized by high adsorption capacity and selectivity, low cost, broad adsorption temperature ranges, moderate adsorption heat, and good cycle stability, shows promising potential for industrial applications.

B04-46

Magnetic coal gangue-based catalysts for peroxymonosulfate activation and benzo[a]pyrene degradation: The construction of Fe and N dual active sites

Chao Liang*

China University of Mining and Technology (Beijing)

The magnetic CG-based catalysts were successfully prepared by impregnation-calcination method with iron (Fe) and nitrogen (N) co-doping for peroxymonosulfate (PMS) activation, illustrating excellent catalytic property with 100.00% removal rate of benzo[a]pyrene (BaP). Additionally, Fe/N co-doped CG catalysts (Fe-N-CG) possessing desirable performance against co-existing anions and organic matter (HA), with nearly 80.00% removal rate in actual water systems. The mechanism of activating PMS and removing BaP was comprehensively analyzed through a series of characterizations and experiments, proving that the Fe and N double reaction sites could enhance the contribution of radical paths and non-radical paths for BaP degradation. Finally, the safety and prospect for practical environmental remediation via Fe-N-CG for PMS activation were further evaluated by ECOSAR toxicity analysis software and mung beans growth experiments. In summary, the development of Fe-N-CG widened the high value utilization of CG and supplied a deep insight into the restoration of organically polluted environments.

B04-47

废弃二硅化钼与铜渣共同还原熔炼制备钼铁合金

刘志*

中国矿业大学

随着工业技术的发展,硅钼棒的使用量不断增加,大量使用后失效的废弃硅钼棒被堆弃在工厂和实验室内,造成大量的资源浪费以及环境污染。本文提出了使用废弃硅钼棒与铜渣共同还原熔炼制得钼铁合金的创新工艺,加入 CaO 与 CaF₂ 作为添加剂,焦炭作为还原剂,对废弃硅钼棒与铜渣两种固体废弃物进行了共处理。CaO 作为脱硅剂,破坏铜渣中铁橄榄石的复杂结构并且促进 MoSi₂ 中 Mo 元素与 Si 元素的分离,降低反应的吉布斯自由能,促进固体废物中 Fe 与 Mo 元素的还原。通过研究金属相和渣相的形成,揭示了捕集机理。在最优条件下,Fe 和 Mo 的回收率分别为 97.27%和 95.86%。残渣主要成分为 CaO、SiO₂ 和 Al₂O₃,可用于无害化建筑材料的制备。

B04-48

镁锰类水滑石与重金属界面反应及其资源再生利用

陈梅青*

广东工业大学

重金属-抗生素复合污染不仅对生物和人类的危害较单一污染大,而且修复难度更大,是当前环境修复的重大挑战之一。基于镁锰类水滑石(MgMn-LDH)独特的结构和良好的吸附/催化性能,研究其与重金属的界面反应特征及资源化降解抗生素的机理。研究发现,Cu²⁺通过形成CuCO₃和Cu(OH)₂而被固定在MgMn-LDH上,Co²⁺取代了MgMn-LDH晶体结构中的Mg²⁺,进而形成CoMn-LDH。固定Cu²⁺和Co²⁺的过程改变了MgMn-LDH的表面电荷性和氧化还原性,反应后所得材料(MgMnLDH-Cu-4和MgMnLDH-Co-4)具有丰富的氧空位。Cu/Co和Mn的协同作用增强了MgMnLDH-Cu-4和MgMnLDH-Co-4的催化活性。MgMnLDH-Co-4优异的催化活性得益于其结构中丰富的氧空位及Mn与固定在晶格中的Co之间强烈的协同作用。吸附铜后的镁锰类水滑石饱和吸附剂经过300°C煅烧后,得到了稳定的复合再生材料(CuO-MgMn-LDO-300)。复合再生材料中丰富的氧空位有利于电荷的转移,且Cu和Mn之间的金属协同作用促进Cu²⁺/Cu⁺和Mn⁴⁺/Mn³⁺循环的进行,强化其活化过二硫酸盐(PS)降解磺胺甲恶唑(SMX)的性能。CuO-MgMn-LDO-300还具有优异的可重复使用性和稳定性,并且能活化PS降解超过95%的其他类型典型抗生素,如环丙沙星(CIP)、四环素(TC)和磺胺嘧啶(SD),证实了饱和吸附剂(Cu-MgMn-LDH)资源化利用的高附加值和可行性。本研究不仅为重金属-有机物复合污染的治理提供新思路 and 科学依据,有助于理解锰矿物对污染物环境归趋的影响,而且拓展了锰矿资源在环境修复方面的应用,为土壤复合污染的原位修复提供理论基础。

B04-49

基于海泡石微结构原位合成CoFe₂O₄纳米颗粒用于高效去除水中磺胺甲恶唑的机制赵宁¹、魏燕富²、刘冬³、袁鹏^{*4}

1. 沈阳工业大学
2. 澳门科技大学
3. 中国科学院广州地球化学研究所
4. 广东工业大学

磺胺甲恶唑(SMX)是一种典型的磺胺类抗生素,广泛用于抑制人体细菌感染。由于SMX易迁移,稳定性强,生物降解性弱,常规的生物法废水处理工艺对SMX去除效率较低。近几十年来,SMX在生活污水及天然水环境中频频高浓度检出,这对环境安全构成严重威胁。因此,如何高效去除水中SMX,是目前急需解决的重要水环境问题。

近年的研究表明,过渡金属化合物催化过硫酸氢盐(PMS)所产生的活性氧可用于降解有机污染物,这引起了研究者的广泛兴趣。铁酸钴(CoFe₂O₄)是一种可高效活化PMS的过渡金属氧化物催化剂。然而,CoFe₂O₄在制备过程中易团聚,活性位点难以暴露。因此,急需寻找一种载体材料来抑制CoFe₂O₄的团聚。海泡石(Sep)是一种天然粘(黏)土矿物,具有独特的纳米通道、高孔隙率及表面易改性等特点,被认为是应用前景广阔的催化剂载体材料。其中,海泡石外表面纳米通道(即表面凹槽处)的硅烷醇基团(Si-OH)是能接枝氧化物的活性位点;因此,纳米颗粒可通过与海泡石表面Si-OH的键合固定于外表面凹槽,从而可望有效控制纳米颗粒的团聚。基于这一思路,本研究成功地将CoFe₂O₄均匀负载于海泡石表面凹槽微结构中,进而建立了CoFe₂O₄-Sep/PMS催化体系,旨在加速PMS对SMX的氧化降解。研究表明,CoFe₂O₄纳米颗粒均匀负载于海泡石表面,其粒径约2-4nm,呈高度分散。该复合材料表现出比纯CoFe₂O₄更高的催化活性,CoFe₂O₄-Sep/PMS在20min的连续反应中实现了接近100%的SMX去除率,而CoFe₂O₄/PMS对SMX的去除率仅约76%;并且CoFe₂O₄-Sep在SMX催化降解过程中显示了高稳定性和良好的再生性。CoFe₂O₄-Sep/PMS体系产IO₂降解SMX主要存在两种转化途径,即苯环上胺基的氧化和磺酰胺键的断裂。本工作为海泡石作为载体制备高效催化剂用于水中磺胺类抗生素的去除

提供了一种新策略。

B04-50

铜渣与钨钼尾矿高温烧结制备透水砖的工艺优化

张保敬*

中国矿业大学

钨钼矿和铜渣排放量大、综合利用率低，大量的尾矿堆积不仅造成资源能源的浪费，还对周围环境造成污染。透水砖具有良好的保水透水性能，可有效缓解城市内涝和热岛效应，以固废为原料制备透水砖可以实现资源循环利用。本文以钨钼尾矿和铜渣两种固废为原料制备透水砖，将不同固废组元协同利用，对制备透水砖的工艺条件进行研究，根据其物相和形貌变化探讨反应机理，克服以往固废基透水砖抗压强度和透水系数低的问题。当烧结温度为 1050°C，保温时间为 60 min，成型压力为 6MPa 时，透水砖的抗压强度、孔隙率和吸水率分别为 38.38MPa、18.83%和 8.37%，透水系数满足国标要求。本工艺实现固废资源化的协同利用，也为处理与钨钼尾矿成分相似的铝硅基固废提供了新的思路和应用前景。

B04-51

凹凸棒石基锂离子电池隔膜的制备及性能研究

刘芳芳、牛继南*

中国矿业大学材料与物理学院

目前，商用锂离子电池隔膜主要是聚烯烃隔膜，然而其存在电解液润湿性差、离子电导率低、热稳定性差、易被锂枝晶刺穿等问题，易引起安全事故的发生。因此，具有优异热稳定性和力学性能隔膜对保障电池安全具有重要意义。针对聚烯烃隔膜存在的热稳定性差等问题，选用具有优异热稳定性、发达孔道结构、丰富储量、绿色环保的天然黏土矿物凹凸棒石（ATP）为基体，通过静电纺丝法和相转换法，合成了热稳定性优异、孔道发达、电解液润湿性良好的凹凸棒石基隔膜。探究了凹凸棒石对所制备的复合隔膜厚度、孔隙率、吸液率、热稳定性、离子电导率、形貌、化学稳定性等的影响。结果表明制备的复合隔膜孔隙率、吸液率、离子电导率、热稳定性、化学稳定性等均优于商业聚烯烃隔膜。引入凹凸棒石后，隔膜的热尺寸稳定性显著升高，在 180 °C 下加热处理 30 min，商用 Celgard 2500 显著收缩，而复合隔膜性状几乎未发生变化，这主要是由于凹凸棒石具有优异的热稳定性导致的。凹凸棒石的表面基团与电解液中碳酸酯基团之间具有良好的亲和力赋予了复合隔膜优异的电解液润湿性（电解液接触角接近于 0°）；凹凸棒石中丰富的孔结构协同复合隔膜中的发达孔隙，使得复合隔膜具有高吸液率和孔隙率，这些孔道可以为锂离子的传输提供便利的通道，高孔隙率、吸液率和优异电解液润湿性协同作用，使得复合隔膜表现出 0.84 mS/cm 的高离子电导率。综上所述，凹凸棒石基隔膜具有高孔隙率、高吸液率、高离子电导率、优异热稳定性和电化学稳定性，以凹凸棒石为基体制备高性能复合隔膜，可以为凹凸棒石的高附加值应用提供新思路。

B04-52

磷改性黏土矿物对稀土污染土壤的钝化修复效能及机制

李鸿博、龙诗琴、项江欣、陈情泽、朱润良*

中国科学院广州地球化学研究所

稀土元素作为新兴的土壤污染物已引起越来越多的关注。高效、经济、环保的土壤改良剂对土壤污染土壤的原位修复是迫切需要的。本研究研制了磷改性的偏高岭土(MK-P)作为土壤改良剂，用以实现固定土壤中的稀土元素，减少其在空心菜中的生物积累。以偏高岭土和 KH₂PO₄ 为原料，采用机械化学和热处理相结合的方法制备了 MK-P。结果表明，在 MK-P 中产生磷酸铝钾和活性 Al-O-P 位点，有利于稀土的

固定和磷的控制释放。施用 3% MK-P 显著降低土壤有效态稀土含量 76.7%~99.2%，显著降低空心菜嫩芽(可食部分)稀土含量 43.0%~57.3%。相关分析表明，MK-P 对稀土元素固定化作用的增强可能与土壤 pH 和速效磷的增加有关，MK-P 的施用改善了土壤肥力，使植株产量提高了 14.8%~20.1%。这些结果表明，MK-P 可以作为一种有前景的土壤改良剂，可有效降低污染土壤中稀土元素的生物有效性，改善土壤质量。

B04-53

磷石膏对石灰石粉-C12A7 体系的影响机制

张林晓涵、董必钦、王琰帅*

深圳大学

石灰石粉、磷石膏是两种常见的工业固体废弃物。本文以石灰石粉作 CaCO_3 源，以磷石膏作 CaSO_4 源，明晰了磷石膏对石灰石粉-C12A7 体系的影响机制。首先，加入磷石膏后，钙矾石($3\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3\cdot3\text{CaSO}_4\cdot32\text{H}_2\text{O}$)会优先于单碳型碳铝酸钙($3\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{CaCO}_3\cdot11\text{H}_2\text{O}$)生成，这使得初凝时间由数分钟延长至 47-143 min，显著改善了工作性能；其次，探明了本体系的主要胶凝物相是单碳型碳铝酸钙、钙矾石和 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 微晶。由于 CO_3^{2-} 的存在，即使没有磷石膏剩余，钙矾石仍能保持稳定、未转化为单硫型硫铝酸钙($3\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{CaSO}_4\cdot12\text{H}_2\text{O}$)；最后，探究了磷石膏掺量对水化产物含量和基体力学性能的影响。随着磷石膏掺量由 1%增至 9%， $\text{Al}(\text{OH})_3$ 微晶持续减少，钙矾石含量持续增加，而单碳型碳铝酸钙含量先增后减。这说明合适掺量的磷石膏可以促进碳铝酸盐的生成。随磷石膏掺量增加，基体的抗压强度先增再减，其中，掺入 5%磷石膏的试样 28 天抗压强度可达 71.02 MPa，为几组中的最佳值。

B04-54

海泡石矿物制备介孔硅酸镁材料及其吸附霉菌毒素性能研究

李艳^{1,2}，梁金生^{1,2,*}，田光燕^{1,2}，韩筱玉^{1,2}

1.生态环境与信息特种功能材料教育部重点实验室(河北工业大学)，天津 300130

2.河北工业大学能源与环保材料研究所，天津 300130

介孔硅酸镁材料因其结构稳定、价格低廉、生物毒性小等特性在污染物吸附去除领域受到广泛关注。然而，介孔硅酸镁材料在制备及应用过程中存在合成原料单一、合成过程复杂、表面可用活性位点少等问题。针对上述问题，基于海泡石矿物独特的组成与结构特点，通过两步水热方法，成功制备了系列介孔硅酸镁材料。制备的介孔硅酸镁材料具有 521.75 m^2/g 的高比表面积，以及丰富的 Si-O-Mg、Mg-OH、Si-OH 等表面活性位点，从而对黄曲霉毒素 B1 (AFB1) 表现出良好的吸附能力，最大吸附量可达 21.26 mg/g 。结合密度泛函理论(DFT)计算可知，AFB1 倾向于以平行硅酸镁(020)表面的形式被介孔硅酸镁吸附，电子给体-受体作用和氢键作用是主要的吸附机理。本工作为天然粘土矿物基介孔硅酸盐材料的可控合成及功能化应用奠定了研究基础。

B04-55

纳米氧化锌/锂电石复合材料光催化 CO_2 还原性能研究

刘庆欣¹，梅乐夫¹，刘昊²，吕国诚^{*1}，廖立兵¹

1.中国地质大学(北京)材料科学与工程学院

2.中国地质大学(北京)数理学院

近年来， CO_2 排放量的不断增加，使得人们聚焦于实现 CO_2 的捕捉、储存和利用。利用太阳能和半导体光催化剂能够将 CO_2 转化为高能碳燃料(如 CO 和 CH_4 等)，是一种极具潜力的 CO_2 减排和能源可持续发展策略。光催化 CO_2 还原过程的关键在于半导体催化剂的选择，催化剂除了需要满足合适的价带/导带位置、较小的禁带宽度以外，光生电子和空穴的复合速率也是影响其光催化性能的关键因素。新的研

研究表明,极化场工程在改善光催化剂本体和表面的光生电荷分离方面被证明是一种有效的策略。电气石是一种天然环状硅酸盐矿物,可作为光催化剂载体材料,其自极化效应能够将催化剂光生电子束缚在电气石表面静电场正极,将空穴束缚在负极,促进光生电子和空穴的分离,从而提高光催化性能。

本研究制备了纳米氧化锌/锂电气石复合材料,探究了锂电气石占比对纳米氧化锌/锂电气石复合材料光催化 CO₂ 还原性能的影响,并对锂电气石提高氧化锌光催化 CO₂ 还原性能机理进行研究。主要研究结果如下:

(1) 通过静电自组装法制备了纳米氧化锌/锂电气石复合材料,研究了复合材料物相组成、形貌、表面电位等性质,结果表明带正电荷的 ZnO 纳米微球均匀分布在带负电荷的电气石表面,二者在静电引力的作用下紧密结合在一起。

(2) 对复合材料进行气固反应光催化 CO₂ 还原性能测试,结果表明当锂电气石占比为 50%时,复合材料光催化 CO₂ 还原的主要产物为 CO,其单位催化剂平均产率为 31.5 μmol/g_{cat}/h,较纯纳米氧化锌的单位催化剂 CO 产率(1.7 μmol/g_{cat}/h)提高 18.5 倍,同时 CO 选择性高达 84%。

(3) 通过光学表征发现,锂电气石的加入能够减小复合材料的禁带宽度,同时促进半导体光催化剂光生电子和空穴的分离,提高复合材料光催化 CO₂ 还原性能。

B04-56

一种高熵稀土双硅酸盐涂层的设计、制备及抗 CMAS 腐蚀研究

刘雨东

中国矿业大学

碳化硅陶瓷基复合材料是新一代涡轮发动机叶片的首选材料,而提高环境障涂层的抗 CMAS 腐蚀能力对航空航天发动机叶片的实际应用具有重要意义。本文通过固相烧结法制备了一种高熵等摩尔稀土双硅酸盐(Y_{0.25}Ho_{0.25}Yb_{0.25}Lu_{0.25})₂Si₂O₇,发现其能在 1300℃ 的高温下一定程度上抵抗 CMAS 的腐蚀。腐蚀后样品表面出现 CMAS 熔盐反应析出的 CaSiO₃ 新相。同时,样品由表及里分别出现 Ca-RE-Si-O 磷灰石相以及 Ca²⁺扩散相。随着腐蚀时间的加长,反应前沿向基体内部移动,从而使磷灰石相反应层厚度增加,有效阻挡了 CMAS 熔盐的继续渗透,提高了稀土双硅酸盐的抗 CMAS 腐蚀能力。这项工作设计了一种高熵陶瓷,利用鸡尾酒效应综合调控材料的抗 CMAS 腐蚀能力,为环境障涂层的抗 CMAS 腐蚀能力的提高提供了见解。

B04-57

失活 SCR 催化剂为原料制备纳米 TiO₂ 光催化剂研究

马佳蓉、徐绍帅、孙思佳*、丁浩

中国地质大学(北京)

SCR 催化剂是燃煤电厂脱硝系统的核心组件,其价格高昂且更换频繁。为了减少环境污染和资源浪费,本研究致力于将废弃资源失活 SCR 催化剂中的 TiO₂ 进行回收处理并加以材料化应用,具有显著的环境和经济价值。本研究首先采用湿法机械研磨,将失活 SCR 催化剂制备成纳米 TiO₂ 光催化剂。优化的工艺条件为料浆浓度 30%、球料比 4:1、研磨时间 1.5 小时。研磨制备的 TiO₂ 中位径为 0.589 μm,比表面积 48.13 m²/g,主要由锐钛矿型 TiO₂ 组成。研磨制备的 TiO₂ 在紫外光照 60 分钟内对罗丹明 B、四环素和甲基橙的降解率接近 100%。进一步采用 NaOH 溶液处理,以提高其光催化性能。在 NaOH 浓度 5 mol/L、处理温度 80℃、处理时间 2 小时的优化条件下,研磨碱处理制备的纳米 TiO₂ 光催化剂中 TiO₂ 含量提高至 90.41%,中位径为 4.98 μm,比表面积 50.88 m²/g。研磨碱处理纳米 TiO₂ 光催化剂对罗丹明 B、甲基橙和四环素的降解率接近 100%,其光催化性能优于研磨制备的 TiO₂ 并与市售 P25 相当。最后,通过湿法机械研磨方法,将研磨碱处理纳米 TiO₂ 光催化剂负载在无定型 SiO₂ 微球表面,制备了 TiO₂-SiO₂ 复合光催化剂。优化条件为料浆浓度 30%、Si/Ti=3:2、球料比 5:1、研磨时间 0.5 小时。TiO₂-SiO₂ 在紫外光照 60 分钟内可完全降解甲基橙,其光催化性能与研磨碱处理纳米 TiO₂ 光催化剂相当,并具有更好的回收和循环使用性能。本研究展示了通过利用废弃资源失活 SCR 催化剂制备高性能纳米 TiO₂ 光催化剂及其复合材料的可行性和潜

在价值。

B04-58

Contributions of TCA-KTTO-modified quartz tailings and CPE toughener in PVC composites to enhance the mechanical-thermal performance

张有鹏

中国地质大学

目前,大量石英尾矿(QT)堆积如山,难以有效处理。利用石英尾矿作为高需求聚合物材料填料是大规模、高价值利用固体废弃物的有效策略,符合可持续发展的目标。mQT/PVC和氯化聚乙烯(CPE)-mQT/PVC复合材料是通过干法改性、CPE增韧处理后由开炼热压制备而成。偶联剂分子通过Si-O-Ti键接枝到mQT表面。mQT在PVC基体中均匀分散并紧密附着,尤其是在钛酸酯偶联剂用量为2.0 wt%时。50 wt%-mQT/PVC的密度、表面硬度、杨氏模量、弯曲模量和热导率分别增加了28.50%、19.64%、247.94%、88.61%和153.11%。50 wt%-mQT/PVC的T40 wt%达到487.39 °C。经过增韧处理后,15.0 phr-CPE-mQT/PVC的冲击强度比mQT/PVC提高了47.38%。中试结果表明,mQT/PVC、CPE-mQT/PVC复合板材和CPE-QT/CaCO₃/PVC共挤空心地板符合中国标准GB/T 24508-2020。mQT/PVC和CPE-mQT/PVC复合材料具有优异的力学性能和较高的热稳定性、热导率和玻璃化转变温度。该研究提供了一种经济的QT/PVC复合材料,并提出了一种可持续的固体废弃物资源化利用策略。

墙报

B04-P01

Reaction thermo-kinetic mechanism for the recovery of Nd-Fe-B magnet sludge by low-temperature selective chlorination

Haibo Xu, Qiang Ma*

Ganjiang Innovation Academy, Chinese Academy of Sciences, Ganzhou, Jiangxi 341119, China

Recovery of rare earth elements (REEs) from bulk Nd-Fe-B scrap by chlorination with NH₄Cl as a chlorinating agent has been reported to be an energy efficient and environmentally friendly method. However, the reaction mechanism and phase evolution of the low-temperature selective chlorination process of Nd-Fe-B sludge are not clear. In this paper, we have systematically investigated the low-temperature selective chlorination process of Nd-Fe-B sludge with NH₄Cl by combining thermo-kinetic theoretical calculations and experiments, and revealed its reaction mechanism. The phase evolution during chlorination was determined by XRD, SEM and EDS characterization as well as computational analysis of the phase stability diagram of the M-O-Cl system. To determine the optimum chlorination conditions, the effects of chlorinating agent dosage, reaction temperature and reaction time on the reaction were investigated. The results showed that the rare earth components in Nd-Fe-B sludge were selectively chlorinated to RECl₃ and avoided the formation of the REOCl in the temperature range of 300-420 °C, while the iron components were preferentially oxidized to Fe₂O₃. The selective chlorination reaction conformed to the unreacted shrinking core model, and the rate-controlling step of the reaction was the internal diffusion process of NH₄Cl through the transition layer of the reactant product to the surface of the Nd-Fe-B sludge. The complete chlorination of REEs was successfully achieved and 99.8% of REEs were selectively extracted into the leaching solution under optimal chlorination conditions (300 °C, 2.5 times of stoichiometric amount, 4 h).

B04-P02

基于煤岩组分调控的煤基石墨构筑及其电化学储锂性能研究姚宗序^{1,2}、徐天齐^{1,2}、谢雨彤²、谢正杰²、董良^{*1,2}

1. 中国矿业大学煤炭加工与高效洁净利用教育部重点实验室
2. 中国矿业大学化工学院

以煤为原料制备高端炭材料是煤炭资源高值化利用的重要途径之一，煤有机大分子结构差异对其功能应用有着重要的影响。本文通过重选法获得不同镜质组比例煤样，并系统研究了煤岩组分调控对高温石墨化后的石墨观结构和储锂性能的影响。结果表明：富镜质组煤样较富惰质组煤样拥有较短的脂肪侧链，弱化了炭化过程中无序交联结构的建立，同时具有更丰富的稠环芳烃，促使高温石墨化过程中煤有机质向石墨微晶结构转变更加迅速。电化学结果表明，富镜质组煤基石墨用作锂离子电池负极材料时具有优异的储锂特性，在 0.1C 电流密度下可逆比容量为 355mAh/g，在 5C 大电流密度下仍可维持 201mAh/g，在 1C 的电流密度下，循环 850 圈后，其容量保持率接近 100%，展现出良好的倍率特性和优异的循环稳定性，是一种比较理想的锂离子电池负极材料。

B04-P03**Ir/RuO₂ 催化剂通过两种机制在酸性介质中实现稳健的电催化析氧**孔令常¹、吕国诚^{*1}、陈亚楠²、李煜璟³、廖立兵¹

1. 中国地质大学（北京）材料科学与工程学院，地质碳储与资源低碳利用教育部工程研究中心，非金属矿物与固废资源材料化利用北京市重点实验室，矿物材料国家专业实验室，北京，100083
2. 天津大学材料科学与工程学院，高级陶瓷与加工技术关键实验室，复合与功能材料关键实验室，天津 300072
3. 北京理工大学材料科学与工程学院，北京，100081

开发高性能低成本的析氧反应(OER)电催化剂是实现质子交换膜电解水电解(PMEWE)制氢工业化的关键，目前铱基、钌基材料是最先进 OER 催化剂，而钌基稳定性较差、铱基活性不高且成本高昂等问题限制了其工业化应用。因此，设计具有高活性和稳定性、满足大电流和长期运行要求的低铱基催化剂是目前面临的挑战。本工作报道了通过籽晶生长法合成的 Ir/RuO₂ 催化剂，将高稳定性 Ir 沉积在富含氧空位的 RuO₂ 载体上。所获得的 Ir/RuO₂ 催化剂，半电池体系中在 10mA/cm² 下过电位为 197 mV 并保持超过 312 小时的稳定性，全电池体系中在 1 A/cm² 下电池电压为 1.8 V，并 1.8 V 电压下稳定运行下可超过 400 h，显示出良好的稳定性。Ir-RuO₂ 催化剂通过界面耦合作用实现 Ru 与 Ir 之间的电荷重分布，原位衰减全反射表面增强红外吸收光谱表明该催化剂在界面、非界面处通过两种析氧机制（AEM 和 OPM 机制）实现了水电解相对的活性-稳定性平衡，为酸性 OER 电催化剂的设计提供了价值参考。

B04-P04**铁氧化物矿物对聚氯乙烯热解的影响：催化脱氯、氯捕获和碳封存**丁梓奕¹、朱润良^{*1}、谢清如¹、龙诗琴¹、傅浩洋²、陈情泽¹、郗云飞³

1. 中国科学院广州地球化学研究所
2. 新加坡南洋理工大学
3. 昆士兰科技大学

利用铁氧化物催化聚氯乙烯(PVC)热解脱氯是一种很有前景的策略。然而，各种铁氧化物矿物相结构特性的差异可能会导致催化活性的不同。本研究结合实验和理论计算方法，揭示了水铁矿(Fhy)和赤铁矿(Hem)对聚氯乙烯热解特性的影响。研究表明，Fhy 和 Hem 都能降低聚氯乙烯的脱氯温度，从而延缓脱氯中间产物的降解，减少挥发性化合物的排放。Fhy 和 Hem 减少了氯化碳氢化合物的释放，并将氯固定为 Rokuhnite。具体来说，添加 30% 的 Fhy/Hem 后，氯化氢的产率从纯 PVC 的 88.8% 降至 29.9%/55.8%。Hem 的表面催化活性强于 Fhy，因此催化脱氯效果更好；而 Fhy 的比表面积更大（吸附

位点更多), 因此氯固定效果更好。Fhy 和 Hem 还促进了脱氯 PVC 的脱氢芳构化反应, 使残炭产率分别从 45.5% 提高到 65.5% 和 75.8%。这项研究有助于了解含铁矿物在塑料热解中的应用, 控制污染排放和提高热解产品质量。

B04-P05

酸处理蒙脱石低温合成超细钒钼蓝陶瓷颜料

张筱君*

景德镇陶瓷大学

以酸处理的蒙脱石为硅源, $ZrOCl_2 \cdot 8H_2O$ 、 V_2O_5 分别为钼源和钒源, NaF 为矿化剂, 通过机械力化学法制备了超细钒钼蓝 ($V-ZrSiO_4$) 陶瓷颜料。利用 XRD 结合 DSC-TG 分析了颜料的晶体结构和合成过程, 采用 ^{29}Si MAS NMR 和 FT-IR 探究了酸处理蒙脱石的表面键合。同时系统研究了 V/Zr 摩尔比和温度对颜料组成、形貌和色度值的影响。实验结果表明, 相比于商业气相 SiO_2 , 采用细小、高活性的酸处理蒙脱石为硅源, 能够有效将 $ZrSiO_4$ 的合成温度降低至 $600^\circ C$ 。同时, 利用酸处理蒙脱石特殊的多孔网状结构和表面丰富的 -OH, 有利于起到分散作用减小 $V-ZrSiO_4$ 颜料的粒径。当 V/Zr 摩尔比为 0.06 时, 经 $800^\circ C$ 热处理 2 h 后, 制备出兼具优异呈色和超细粒径 $V-ZrSiO_4$ 颜料, 色度值 $L^*=62.14$, $a^*=-11.70$, $b^*=-25.82$, 颜料粒径小于 $1 \mu m$, 有望应用于陶瓷喷墨打印领域。

仅发表论文

B04-PO01

氨基磺酸脱灰制备超纯煤试验研究

张明瑞、张博*

中国矿业大学

制备超纯煤是实现低品质煤清洁高效利用的重要途径。针对传统化学法制备超纯煤所使用的药剂对环境污染较严重且具有强腐蚀性的问题, 本文采用脱灰效果好、反应速率快, 同时毒性小、便于储运的氨基磺酸作为浸出剂制得灰分为 0.92% 的超纯煤。探究了温度, 时间和浓度对反应过程的影响, 并分析了煤在氨基磺酸处理后元素组成, 微观结构, 官能团含量的变化规律。研究表明, 浸出过程中浓度和温度对产品灰分影响较大, 反应时间的影响较小。在氨基磺酸体系下, 煤中的铁, 钙和镁得到了有效脱除, 而对硅和铝的效果一般。在氨基磺酸体系下, 煤光滑致密的微观表面被破坏。煤中的含氧官能团结构变化较大, 芳香性得到提升。超纯煤样品的 CH_2/CH_3 比值从原煤的 0.72 提升至 1.23, 说明氨基磺酸使煤中芳香环边界的脂肪族链变长, 支链化程度减弱, 增强煤的氧化活性。煤的孔隙结构变丰富, 比表面积和孔容均有提升, 平均孔径变小。氨基磺酸处理后的煤初始热解温度与原煤相比略有提前, 超纯煤失重量总体低于原煤, 表明煤中更少的挥发性成分析出。

B04-PO02

锡焙砂还原熔炼及元素高效分离调控

程俊生*

中国矿业大学

我国锡矿石品位低、嵌布粒度细、多金属复杂共伴生、含硫 含砷高的难选冶资源禀赋属性。复杂锡多金属矿中, 砷、硫等有害杂质将造成烟尘处理流程长、冶炼渣渣量大、金属回收率低等问题, 精矿中伴生锑、铟、铋等关键金属也难以得到有效回收。伴生的 Fe、Pb、Cu、Si、Ca、Mg、Al、Ag、Sb、Bi、Zn、As 等杂质元素不可避免地进入到锡的冶炼流程中, 进而对锡精矿的还原熔炼过程造成很大影响。这就需要 对还原熔炼工艺过程中的元素分布规律进行研究, 便于控制中间产品中杂质元素含量, 形成锡的清洁高效生

产过程的理论基础。

热力学计算表明, Sn 和 Fe 的存在, 一方面以合金的形式存在进入粗锡, 另一种则是以硬头的形式进入尾渣中。Al、Si、Ca、Mg 都会以氧化物的形式进入渣中。锡冶金行业研究表明, 炼锡主要采用 FeO-SiO₂-CaO 三元渣系, 通过调节三者配比, 可以最大程度提高锡锭纯度。

实验结果表明, 锡对还原温度变化相当敏感, 过高温度会导致锡的挥发增加导致得到的锡锭品位降低, 且温度过高会使铁大量被还原, 使炼锡副产物硬头增加。

B04-PO03

铜渣熔融还原制备铜铁合金及合金纯净化的工艺研究

展雪*

中国矿业大学

随着铜冶炼技术的发展, 我国铜产量逐年增长, 而铜渣的排放量也逐年增长。铜渣作为一种二次资源, 其利用价值、含铜量和含铁量均高于矿石开采品位。一般来说, 目前铜渣利用技术的研究多集中在单独提取铜或铁, 未能使铜和铁同时得到有效利用。同时提取铜和铁的研究较少, 且大多采用气体还原剂, 但气体在反应体系中存在的时间短, 利用率低。基于此, 本研究提出了利用焦炭熔融还原铜渣制备铜铁合金的新思路。本论文分析了焦炭还原铜渣过程的热力学, 通过单因素实验研究了反应温度、CaO 加入量、保温时间和还原剂加入量对还原过程的影响。得到结论: 在还原温度 1500°C, 碱度 1.2, 保温时间 1.5h, 还原剂加入量为铜渣中各氧化物反应生 CO 所需焦炭量的 0.7 倍时, 铜渣还原效果最佳。

B04-PO04

煤矸石活化制备硅肥及重金属吸附研究

王世兴、张博*

中国矿业大学

煤矸石中含有丰富的硅元素和植物生长过程中所必需的微量元素, 可将其制成硅肥, 实现煤矸石的资源化利用。本文研究了焙烧温度对煤矸石中硅元素活化的影响机制, 并以 MgSO₄ 为活化剂, 通过热活化耦合化学活化探究了活化过程的反应机理以及最佳反应条件。结果表明, 热活化对煤矸石中的硅元素具有良好的活化效果, 最佳焙烧温度为 800 °C, 在当前焙烧温度下添加 MgSO₄ 活化剂, 煤矸石与 MgSO₄ 的质量比为 1: 0.5, 有效硅含量从 985.38 mg/kg 提升至 3897.20 mg/kg。最后采用单因素静态吸附试验探究煤矸石硅肥重金属吸附性能。结果表明, 煤矸石硅肥对重金属具有较好吸附效果, 在溶液 pH=9、吸附时间为 2 h、投放量为 0.7 g/L 的条件下, 煤矸石硅肥对水中 Cu²⁺和 Pb²⁺的吸附量最佳, 去除率为 57.43%和 65.74%。

B04-PO05

基于柠檬酸回收废旧电路板中锡元素试验研究

李祎、张博*

中国矿业大学

废旧印刷电路板作为“城市矿山”的核心, 其金属种类多、含量高, 是一种优质的有色金属二次资源。锡作为电路板中最主要的金属元素之一, 是现代工业不可或缺的战略型金属, 具有极高的回收价值。本文针对废旧印刷电路板中锡元素的回收展开研究。以柠檬酸作为有机浸出剂, 探究不同反应条件下废旧电路板中锡元素的浸出效果, 探究锡元素在柠檬酸环境下的提取机制。结果表明, 柠檬酸对废旧电路板中的锡元素有良好的选择性提取效果。在柠檬酸浓度为 0.5 mol/L、固液比为 15 g/L、反应温度为 40 °C、反应时间为 120 min、搅拌速率为 500 r/min 时获得最佳效果, 浸出率达 84.95%, 为废旧电路板中金属资源的利用提供了理论依据。

B04-PO06

烟煤基高比表面积多孔炭材料的制备及其碘吸附性能研究

谢雨彤、董良*、姚宗序、徐天齐、唐志强、高佳乐、余佳慧
中国矿业大学

核裂变的产物放射性碘会对人体和环境造成伤害，煤基多孔炭因其低成本、高比表面积，常用作去除水中污染物的吸附剂，寻求煤基多孔炭最佳制备工艺并用于废水中碘的去除是至关重要的。本文以低阶的不粘煤为前驱体，用炭化—KOH 活化的方式制备煤基多孔炭并通过碘吸附量、比表面积确定最佳工艺。研究了孔隙结构、微观结构、缺陷程度的变化规律，为后续煤基多孔炭材料的制备与研究奠定了一定基础。最佳制备条件为：炭化温度为 1000°C、升温速率 5°C/min、保温时间 2h，活化温度 850°C、升温速率 5°C/min，保温时间 2h，炭碱比 1: 2。此条件下制备的煤基多孔炭比表面积高达 2160.07m²/g，碘吸附值 1049.49mg/g，全孔孔容 0.97cm³/g，微孔孔容 0.44cm³/g，兼有多级孔径结构。表征结果表明，活化反应的加入会使材料的缺陷程度降低，且缺陷程度与碘吸附值呈反比；炭化温度的改变对活化反应的进行程度影响较大，进而影响了分子结构和表面形貌；炭化温度和活化温度的改变还会对孔结构的演变造成影响。

B04-PO07

高性能钠离子电池 C/C 复合材料制备及其储钠机理研究

徐天齐^{1,2}、姚宗序^{1,2}、唐志强^{1,2}、董良^{*1,2}

1. 中国矿业大学化工学院
2. 煤炭加工与高效洁净利用教育部重点实验室

煤炭具有成本低廉、活性位点高、炭收率高的优点，使其在钠离子电池硬炭负极具有广阔的前景。然而，通过简单的制造工艺构建合理的碳结构以实现卓越的钠储存仍然具有挑战性。在此，我们介绍了一种共炭化工艺制备 C/C 复合材料，提高煤基硬炭负极储钠能力。通过在煤中引入葡萄糖颗粒，制备不同比例煤与葡萄糖共炭化硬炭负极，其中煤与葡萄糖比例为 1:1 时制备的硬炭负极(CC11)具有 577.79 mAh·g⁻¹ 的高比容量，远高于直接炭化时的储钠容量 (382.82 mAh·g⁻¹)。对三种比例下的煤基硬炭进行 EIS 测试，通过比较其 warburg 阻抗，发现阻抗由小到大为 CC12(0.644 mMho)、CC11(1.51 mMho)、CC21(4.48 mMho)。采用 Materials Studio 构建对应比例煤与葡萄糖结构模型，通过 Lammmps 进行分子动力学模拟得到共炭化模型，并进行均方位移计算各结构的扩散系数，结果表明，CC12 的扩散系数为 8.195×10⁻⁸ m²/s，CC11 的扩散系数为 4.320×10⁻⁸ m²/s，CC21 的扩散系数为 3.564×10⁻⁸ m²/s，CC12 扩散最快，CC21 扩散最慢，与 EIS 结果一致，这得益于 CC12 在共炭化过程中葡萄糖多数与煤交联，产生丰富的孔隙结构。

B04-PO08

基于烟煤显微组分差异的预氧化策略构筑钠离子电池硬碳负极

唐志强^{1,2}、姚宗序^{1,2}、徐天齐^{1,2}、董良^{*1,2}

1. 中国矿业大学化工学院
2. 煤炭加工与高效洁净利用教育部重点实验室

高比容量、低成本的硬炭是极具潜力钠离子电池负极材料。以煤炭为前驱体构筑的硬炭材料具有低成本、导电性高和化学稳定性好等特点，但因前驱体复杂的分子结构导致其氧化特性和结构演化的不可控，阻碍其在钠离子电池领域的大规模应用。鉴于此，我们通过密度梯度离心的方法分选出组分相近、结构相似显微组分，结合固体核磁 (¹³C CP/MAS NMR) 等测试结果建立不同煤炭显微组分的平面分子模型。借助分子力学和退火动力学对分子模型的整个势能进行优化，获得不同显微组分的全局最低能量的立体模型。在此基础上，通过预氧化策略交联烟煤显微组分，借助 X 射线光电子能谱等测试考察显微组分结构特征对氧化反应过程中元素组成和官能团种类的影响，再结合蒙特卡洛方法计算氧分子的吸附行为，得出脂肪族

结构占比多的组分表现更高的氧化反应活性和更多的氧分子吸附量,生成更多的交联基团。这有助于限制高温炭化过程中碳层的重排,形成更多的超微孔,获得高容量硬炭。实验结果表明,富镜质组煤衍生硬炭的容量为 330.2 mAh/g,优于富惰质组煤衍生硬炭的 260 mAh/g。本研究为高容量煤衍生硬炭的制备提供了思路,并为其他热化学体系的研究提供了理论指导。

B04-PO9

三维石墨烯负载镍钴催化剂的制备及对临汾褐煤电催化还原研究

关尹双、董良*

中国矿业大学

推进煤炭清洁高效利用,对加快建设新型能源体系、实现“双碳”目标具有重要意义。在这项工作中,我们结合水热还原法和冷冻干燥技术制备出三维石墨烯负载镍钴双金属电催化剂(3D Ni-Co/G),并以负载不同金属的石墨烯复合材料作为工作电极,采用循环伏安法和电流-时间曲线法,在三电极体系下,H型隔膜密闭电解池中,系统地研究了该催化剂对煤模型化合物和山西临汾褐煤(LL)电化学还原反应的催化活性和稳定性。结果表明:所制备的催化剂为三维结构的镍钴双金属/石墨烯复合材料,具有高达 498.11 m²/g 的比表面积且以介孔结构为主。通过调控镍/钴前驱体的比例和煅烧温度,制得不同粒径(11 nm 左右)的金属催化剂。将制备的 3D Ni-Co/G 压在泡沫镍上作为工作电极,对经离子液体溶胀预处理后的 LL 进行电催化还原研究,分离并纯化所得到的固体产物和液体产物。利用 GC-MS 分析了液体产物的组成;对所得固体产物进行 FTIR、固体碳谱核磁和元素分析,研究电解前后煤中官能团及元素的组成变化。结果表明,3D Ni-Co/G 对 LL 的电解还原不仅具有裂解效果,也有部分加氢的效果。与原煤相比,电解煤中苯酚、烷烃、醇和环烷烃等化合物的相对含量有较大提升,且当镍钴比例为 1:1 时,对煤的电还原效果最好。

B04-PO10

煤基材料/硬碳储钠

魏群*

中国矿业大学

钠离子电池由于其资源丰富、成本低廉,低温性好等优势成为开发大规模储能系统的有力候选材料,也是可持续可再生能源储能系统的关键设备。循环寿命、成本和安全性是大规模储能系统的关键指标。硬碳因其资源丰富和成本低廉而被认为是钠离子电池的潜在阳极候选材料。在众多负极材料中,碳基材料因其高比表面积、高导电性、来源广泛、独特的结构稳定性和较低的成本而被广泛认为是具有发展前景的负极材料。此外,具有高度无序性和较高层间距的硬碳阳极表现出更高的存储容量、更低的工作电压和出色的循环稳定性。尽管硬碳负极材料在成本和商业生产方面具有显著优势并取得了一些进展,但人们对硬碳结构中钠离子的存储机制仍然缺乏基本的了解。近年来,煤基硬碳作为钠离子电池的负极材料受到广泛关注。迄今为止,煤基硬碳因其存储容量大、工作电位低和来源稳定而成为一种具有广泛前景的钠离子电池负极材料。一些研究表明,通过在煤基材料中引入缺陷或在碳骨架中构建不同的孔隙结构可以有效提高其性能。此外,煤在成本、规模化生产和商业化方面也具有显著优势。尽管一些研究工作者已经提出并测试了几种有前景的煤基硬碳材料,但由于煤基硬碳的初始库仑效率较低,因此仍需对其进行不断改进。在此基础上,深入研究硬碳存储模型及其钠离子存储机理可以更加全面了解煤基材料硬碳的钠离子存储机理,并合理设计出高性能硬碳负极材料。

B04-PO11

锰(II)卤化物杂化单晶中有机分子-MnBr₄-相互作用及其卫星峰发射的机理

张帅*

华南理工大学

金属卤化物半导体软晶格中普遍存在光诱导自俘获激子发射(STEs)现象,然而,在具有局域发射中心的金属卤化物绝缘体中很少有类似过程。本章合成了一种新型零维 Mn(II)杂化材料[3DPTTP]MnBr₄

(3DPTPP = (3-(二甲氨基)丙基)(三苯基)磷酸铵), 其只有一个 Mn^{2+} 晶格位点, 但有位于约 530 nm 和 630 nm 处的双发射峰。红光发射归属于绿光发射的 MnBr_4^{2-} 四面体的卫星发射峰, 此频移是由能量为 2500 cm^{-1} 的 N-H 振动导致的。可通过拉曼光谱得到直接证明: 当用 785 nm 激光泵浦时, 图谱中出现 N-H 振动模式; 而用 532 nm 激光激发时其消失。此结果与密度泛函理论计算的结果相吻合。光致发光(PL)衰减曲线证明了它们源于具有相同的离子中心, 不同的是, 红光发射在衰减前有明显的上升延迟过程。温度和压力依赖的荧光光谱、温度依赖的 MnBr_4^{2-} 四面体扭曲程度参数以及线偏振发光光谱证实了双峰发射的相似和区别。该研究进一步阐释了杂化 Mn(II) 卤化物中 MnBr_4^{2-} 四面体畸变引起的类自陷态发光过程。