

# 能源催化转化全国重点实验室工作简报

< 2025 年 7 月 >

能源催化转化全国重点实验室编

2025 年 9 月 1 日

## 研究进展

我室利用钡分散策略提升高温 SOEC 阳极析氧反应活性.....	01
我室揭示电催化水氧化析氧反应动力学微观机制.....	02
我室发现调控半导体带隙内缺陷态可提升太阳能光热海水淡化效率.....	04
我室揭示钙钛矿阳极 A 位离子有序性对高温析氧反应的影响机制.....	05

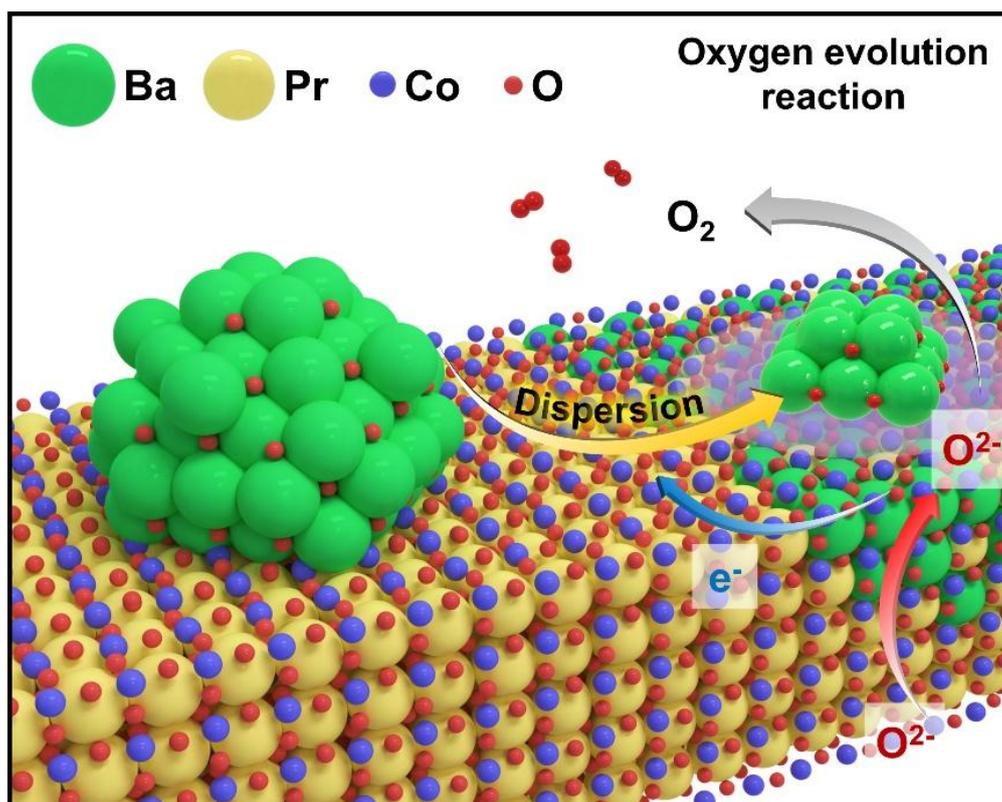
## 新闻动态

我室召开 2025 年学术委员会会议.....	07
我室 3 名博士研究生获得“中国科学院院长奖”.....	08
“第二十二届全国催化学术会议审稿会暨‘问道催化’学术研讨会” 及“第十届中国催化奖评选会”在张掖召开.....	08

## 研究进展

### 我室利用钡分散策略提升高温 SOEC 阳极析氧反应活性

我室碳基资源电催化转化研究组（523 组）宋月锋副研究员等，联合复旦大学汪国雄教授团队、大连工业大学安庆大教授团队，在固体氧化物电解池（SOEC）阳极高温析氧反应（OER）性能调控方面取得新进展。合作团队通过调控阳极材料表面电子结构，提升了高温 OER 活性与稳定性。



SOEC 高温电解二氧化碳（ $\text{CO}_2$ ）是一种前景广阔的碳资源化技术，具有过电位低、电流密度高和能效高等优势，受到能源与环境领域科研人员的广泛关注。其中，OER 作为阳极关键限速步骤，其反应主要集中发生在电极表面。因此，通过调控阳极表面电子结构来提升晶格氧活性和电荷传输能力，是提高 SOEC 整体性能的关键策略。

本研究通过高温自分散方法将钡（Ba）元素分散于  $\text{Pr}_{0.9}\text{CoO}_{3-\delta}$  阳极表面，制备了具有氧化钡（BaO）纳米颗粒负载的  $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}-\text{Pr}_{0.9}\text{CoO}_{3-\delta}$  活性表面结构。研究发现，Ba 元素的引入可使阳极 O 2p 带中心向费米能级上移，提升钴（Co）元素价态，从而降低最小电子跃迁能量，加快阳极表面电荷转移过程。这一改性策略有效降低了阳极电子传输与表面反应过程的极化电阻，同时促进了离子和电子传导。此外，表面 BaO 纳米颗粒还能够促进界面氧溢流过程，从而

增强 OER 性能。该研究不仅为高性能 SOEC 阳极的材料设计提供了新思路，也为开发高效固体氧化物电化学器件提供了理论与实验基础。

相关成果以“Optimizing Surface Electronic Structure by Ba Dispersion for Enhanced High-Temperature Oxygen Evolution Reaction Activity”为题，发表在《美国化学会志》（*Journal of the American Chemical Society*）上。该工作的共同第一作者是我室联合培养硕士研究生刘鹤伟和王梦娜。上述工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金等项目的资助。（文/图 刘鹤伟、宋月锋）

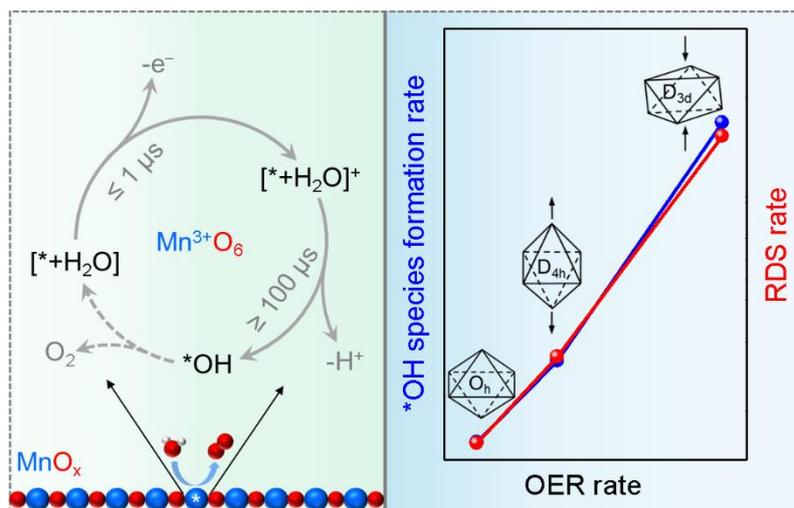
文章链接：<https://doi.org/10.1021/jacs.5c03987>

## 我室揭示电催化水氧化析氧反应动力学微观机制

我室太阳能研究部（DNL16）李灿院士、王秀丽研究员等在电催化动力学机制研究方面取得新进展。团队利用工况电化学瞬态吸收光谱（EC-TAS）技术，观测到了氧化锰基电催化剂催化水氧化反应第一个中间物种（\*OH）形成的动力学过程，揭示了活性位点电子构型对称性破缺对促进水氧化析氧反应动力学具有决定性作用。

水氧化析氧反应（OER）作为提供质子和电子的关键反应，在自然光合作用和人工光合成过程中起着至关重要的作用，探究其催化过程的中间物种转变动力学微观机制具有重要意义。在电催化反应动力学研究中，科研人员主要使用的技术都是（准）稳态表征技术，难以捕捉毫微秒级的反应中间物种转化过程，这制约了电催化 OER 反应动力学的深入研究和认识。

针对上述电催化动力学研究的关键挑战，李灿团队依托多年来在光（电）催化反应时间尺度的时间分辨光谱技术（包括高灵敏慢瞬态吸收光谱，Slow-TAS:  $\mu\text{s-s}$ ；光诱导吸收光谱，PIA:  $\text{ms-s}$ ）的研发经验（*Nat. Commun.*, 2020; *J. Phys. Chem. C*, 2021; *Chem. Sci.*, 2023; *J. Phys. Chem. Lett.*, 2023; *J. Am. Chem. Soc.*, 2023），自主发展了电催化瞬态吸收光谱技术（EC-TAS:  $\mu\text{s-s}$ ）（*Acta Phys.-Chim. Sin.*, 2023），为突破电催化反应动态监测的技术瓶颈提供了新手段。



在本工作中，团队聚焦电催化水氧化反应的中间物种转变动力学问题，以氧化锰基电催化剂（包括  $\alpha$ - $\text{Mn}_2\text{O}_3$ 、 $\gamma$ - $\text{MnO}_2$ 、 $\delta$ - $\text{MnO}_2$  和  $\alpha$ - $\text{MnO}_2$ ）作为模型体系，通过自主研发的工况电化学瞬态吸收( EC-TA )光谱技术，直接研究了电催化 OER 反应动力学。团队直接观测到 OER 第一个中间物种（\*OH）的形成过程，发现在\*OH 物种的形成过程中，电子比质子转移更快，遵循非同步的质子耦合电子转移机制。进一步，团队揭示了\*OH 物种形成速率高度依赖于催化剂活性位点的配位对称性，在具有 D3d 对称性的催化剂上，\*OH 物种形成速率比 D4h 对称性的催化剂提高了约 100 倍，且\*OH 物种的形成速率与 OER 中决速步（RDS）的速率呈正相关。该工作不仅揭示了电催化 OER 动力学的微观机制，还发现 OER 初始速率在整个催化动力学循环中的关键作用，为电催化动力学研究提供了新思路，也为 OER 动力学机制研究提供了新见解。

相关研究成果以“Unraveling the Formation Kinetics of the First Intermediate in the Oxygen Evolution Reaction on MnOx with Different Electron Configurations”为题，于近日发表在《美国化学会志》（Journal of the American Chemical Society）上。该工作的共同第一作者是我室与中国科学技术大学联合培养博士研究生尉瑞芳和 DNL16 组已毕业博士李东峰。上述工作得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金、中国科学院 B 类先导专项“能源电催化的动态解析与智能设计”、辽宁省自然科学基金等项目的支持。（文/图 尉瑞芳）

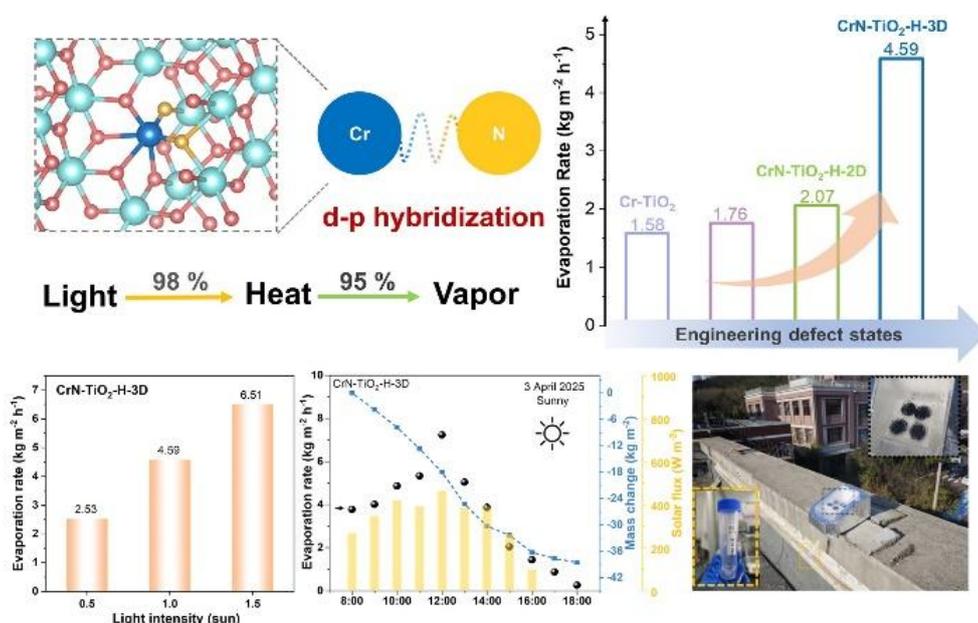
文章链接：<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.4c18273>

## 我室发现调控半导体带隙内缺陷态可提升太阳能光热海水淡化效率

我室分子催化与原位表征研究组（503组）李灿院士团队在太阳能光热转换研究领域取得新进展，通过对典型宽禁带半导体二氧化钛进行过渡金属-非金属共掺杂，在其带隙中构建离散的中间能带（Intermediate band），实现高效光吸收与光热转换，并揭示了缺陷态调控非辐射产热机制，为发展高性能光热材料提供了新思路。

太阳能作为重要的清洁可再生能源，其高效转换利用是人类实现碳中和的重要途径。光热转换技术能够直接利用太阳能，在聚焦太阳能发电、海水淡化和光热催化等领域展现出广阔的应用前景。其中，太阳能水蒸发技术作为一种便捷、高效地获取淡水资源的方式，受到广泛关注。然而，传统半导体基材料的光热转换受限于其宽带隙导致的低吸光效率，以及非辐射复合等问题，限制了光热转换效率的进一步提升。

李灿团队长期致力于太阳能光催化、光电催化、电催化、光伏发电等太阳能转化科学和技术的研究。近期，团队也在太阳能光热转化领域进行了大量探索研究，在热化学循环制氢，光伏-热电耦合发电等方向取得系列进展。本工作从光热转换的本征物理过程出发，通过结构调控引入不同性质的捕获态/缺陷态（Trap/Defect states）作为光生电子-空穴的复合位点，提升了非辐射弛豫效率，实现了全太阳光谱的高效吸收与转换，为太阳能水蒸发等应用开辟了新途径。



李灿团队在前期工作中提出了太阳能分光谱区间热转换利用策略，通过测定太阳光谱各区间的本征光热转换效率，发现紫外光区是转换效率的瓶颈；并通过非金属掺杂，将半导体在紫外光区的转换效率从 65%提升到 82%（ACS Appl.

Energy Mater., 2024)。在本工作中，团队进一步通过对二氧化钛 ( $\text{TiO}_2$ ) 进行铬 (Cr)、氮 (N) 共掺杂，发现掺杂元素 Cr、N 在  $\text{TiO}_2$  晶格中形成了 Cr-N 结构单元。实验证实，Cr 3d 与 N 2p 轨道之间的 d-p 杂化作用在  $\text{TiO}_2$  带隙中构建了中间能带 IBs，充当电子-空穴复合位点，使得其能对紫外光利用效率达到 92.5%，并在全太阳光谱 (250 至 2500 nm) 区间范围内实现 93.4% 的高吸收效率，以及 97.9% 的光热转换效率。基于该材料制备的三维水蒸发器在一个太阳的标准光强下，能够实现  $4.59 \text{ kg m}^{-2} \text{ h}^{-1}$  的水蒸发速率和 94.7% 的太阳能水蒸发效率。户外实验表明， $1 \text{ m}^2$  蒸发器日均可产生约 40 kg 淡水，可满足 20 名成年人的日常饮水需求，展现出了实际应用潜力。

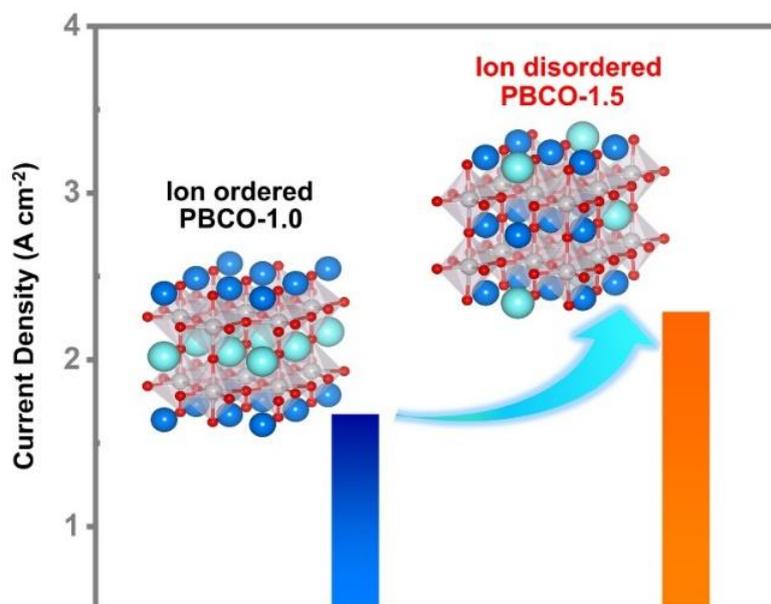
相关研究进展以“Structure regulation of  $\text{TiO}_2$  with transition metal nitride units towards efficient solar energy harvesting”为题，于近日发表在《化学工程杂志》(Chemical Engineering Journal) 上。该工作的共同第一作者是 503 组博士研究生胡芯和助理研究员王升扬。以上工作得到国家自然科学基金委“人工光合成”基础科学中心、国家重点研发计划等项目的资助。(文/图 胡芯、王升扬)

文章链接: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2025.165325>

## 我室揭示钙钛矿阳极 A 位离子有序性对高温析氧反应的影响机制

我室碳基资源电催化转化研究组 (523 组) 宋月锋副研究员等，联合复旦大学汪国雄教授团队、美国佐治亚理工学院刘美林院士团队，在固体氧化物电解池 (SOEC) 阳极高温析氧反应 (OER) 方面取得新进展。合作团队聚焦钙钛矿阳极 A 位离子有序性对高温 OER 性能的影响，系统揭示了  $\text{Pr}_x\text{Ba}_{2-x}\text{Co}_2\text{O}_{5+\delta}$  体系中离子有序-无序转变对微观结构及电催化性能的影响。

SOEC 具有电流密度高、法拉第效率高、过电势低等优势，被认为是二氧化碳 ( $\text{CO}_2$ ) 减排和能源转换的关键技术之一。钙钛矿氧化物是常见的 SOEC 阳极材料，然而，阳极离子有序性对 OER 反应速率的影响尚不明确。



在本工作中，科研人员通过制备两种不同镨（Pr）含量的  $\text{Pr}_x\text{Ba}_{2-x}\text{Co}_2\text{O}_{5+\delta}$ （PBCO-1.0）和  $\text{Pr}_{1.5}\text{Ba}_{0.5}\text{Co}_2\text{O}_{5+\delta}$ （PBCO-1.5）阳极材料，结合同步辐射 X 射线粉末衍射（SXRPD）、高角环形暗场扫描透射电子显微镜（HAADF-STEM）、X 射线吸收谱（XAS）及 18O 同位素交换实验等多种手段，深入剖析了 A 位离子有序-无序转变诱导的电子结构变化及对高温 OER 动力过程的影响。

研究表明，随着 Pr 含量从 1.0 增加到 1.5， $\text{Pr}_x\text{Ba}_{2-x}\text{Co}_2\text{O}_{5+\delta}$  晶体由有序四方相（P4/mmm）转变为无序正交相（Pnma）。这一转变打破了钴-氧（Co-O）局部配位环境的对称性，增强了 Co 3d 与 O 2p 之间的轨道杂化，从而提升了氧离子迁移效率，并加速了表面氧交换反应速率。电化学测试表明，在 800 °C、1.6 V 条件下，PBCO-1.5 阳极的电流密度达到 2.29  $\text{A cm}^{-2}$ ，表现出优异的高温 OER 性能和稳定性。

该研究从实验和理论两个方面阐明了钙钛矿 A 位离子有序性对高温 OER 反应路径和速率调控机制，同时为高性能 SOEC 阳极材料的理性设计提供了参考。

相关成果以“Breaking the Ion Ordering in Perovskite Anode for Enhanced High-Temperature Oxygen Evolution Reaction Activity”为题，发表在《美国化学会志》（Journal of the American Chemical Society）上。该工作的共同第一作者是 523 组博士后于丽娜和美国佐治亚理工学院博士研究生胡学禹。该工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金等项目的资助。（文/图 于丽娜）

文章链接：<https://doi.org/10.1021/jacs.5c09331>

## 新闻动态

### 我室召开 2025 年学术委员会会议

7月20日，我室2025年学术委员会会议在交流中心会议室举行。所长刘中民，实验室学术委员会主任何鸣元院士，实验室学术委员会委员陈军院士、李灿院士、毛新平院士、孙立成院士、孙世刚院士、孙学良院士、田中群院士、吴骊珠院士、赵东元院士、赵天寿院士、黄倬、廉玉波、罗万明、孟海军、吴青、肖成伟、许锦、俞振华，以及科研和职能部门相关人员等100余人通过线上或线下的方式参会，会议由何鸣元主持。



刘中民充分肯定了实验室近两年取得的成绩，他表示，实验室要准确把握国家战略需求，强化使命担当；在新一轮科技体制改革中，要与时俱进，充分发挥关键作用，为国家科技事业发展贡献应有的力量。

实验室主任陈忠伟全面介绍了实验室发展历程，并从承担国家重大科技任务、重大科技成果产出、人才队伍建设与培养、国内外学术合作与交流、实验室平台建设、实验室党建与文化工作、未来的发展方向和规划等方面进行了全面汇报。此外，傅强研究员、范峰滔研究员、邓德会研究员、陈忠伟等分别从催化基础、光催化/光电催化、氢能与多能融合、电化学与储能等四个方面作了专题报告。

在讨论环节中，实验室学术委员会委员们一致认为，实验室在基础研究至产业应用全链条创新体系中取得了系列重要成果，并围绕国家重大需求提出了系统性建议：实验室需勇闯科研“无人区”，构建具有全球影响力的原创催化理论体系；强化“计算-表征-实验”三位一体研究范式，推动人工智能技术与催化研究的深度融合，加快高能耗计算向绿电供能转型；聚焦物质能量转化核心机制，突破全固

态电池新体系及氢能产业化关键技术；布局绿色燃料动力方案，支撑低空经济发展；提升技术转化效能，输出全国重点实验室建设经验；加强国际科技合作，创新人才评价机制，深化与头部企业产学研合作，全面支撑国家“十五五”能源战略科技布局，为构建现代化能源体系提供核心支撑。

下午的报告会议由实验室副主任傅强和范峰滔分别主持，实验室相关课题组科研人员作了工作汇报，内容涵盖催化反应、表界面催化、原位表征、人工光合成、储氢材料、膜催化、燃料电池、理论计算、生物质能源、氢能利用、智能化工模型等重点研究方向。

本次会议形成了系统性咨询建议，为实验室未来发展注入新动能。（文/丁俊霞 图/夏一丁）

### 我室 3 名博士研究生获得“中国科学院院长奖”

中国科学院发布《中国科学院关于公布 2025 年度中国科学院院长奖获奖名单的通知》（科发函字〔2025〕287 号），我室 3 名博士研究生荣获 2025 年度“中国科学院院长奖”。其中，谢威立（导师：杨维慎研究员）、张杰（导师：范峰滔研究员、李灿院士）、张静静（导师：李杲研究员）获得“中国科学院院长优秀奖”。

按照《中国科学院院长奖管理办法》有关规定，经评审，2025 年度共 480 人获“中国科学院院长奖”，其中 80 人获“中国科学院院长特别奖”，400 人获“中国科学院院长优秀奖”。（文/吴燕青）

### “第二十二届全国催化学术会议审稿会暨‘问道催化’学术研讨会”及“第十届中国催化奖评选会”在张掖召开

7 月 25-29 日，中国化学会催化专业委员会在甘肃省张掖市组织召开了“第二十二届全国催化学术会议审稿会”及“第十届中国催化奖评选会”。同时，为促进和提升我国催化领域创新力，催化专委会与国家自然科学基金委联合组织了“问道催化”学术研讨会。催化专委会主任、我室李灿院士，副主任刘海超教授、王建国教授，国家自然科学基金委员会化学科学部二处处长高飞雪，第二十二届全国催化学术会议组委会主席王野教授，部分委员以及催化领域专家等近 70 人参

加了会议。本次会议的成功召开得到了河西学院的大力支持。

7月26日至27日上午召开了“第二十二届全国催化学术会议审稿会”，会议由催化专委会秘书长、我室范峰滔研究员主持。李灿院士在讲话中强调，催化大会几十年来一直维持着很高的声誉和学术品质，其中一个重要原因是催化大会一直坚持审稿的传统，审稿是保障会议学术质量的核心把关机制。河西学院李广校长和赵柱副校长分别致欢迎辞。随后，第二十二届全国催化学术会议组委会秘书长傅钢教授对本届会议的筹备情况以及投稿情况进行了汇报。本届催化大会共收到稿件2293篇，所有稿件经初筛、并经审稿委员会评阅，最终评审出主旨报告79篇，邀请报告125篇，口头报告192篇，墙报1800余篇。

在审稿会期间，还召开了“问道催化”学术研讨会。这次研讨会是一次新的尝试，是学术交流形式的一次创新：由发起人提出问题，引导和激发与会代表共同探讨，回归学术问题的交流和思维碰撞。此次研讨会共筛选出10个问题进行了深度研讨，由刘海超副主任和王建国副主任分别主持。随后，高飞雪处长对催化化学“十五五”发展规划战略研讨的相关工作进行了部署。在研讨会最后，李灿院士建议将“问道催化”研讨持续组织下去，勇于质疑和提问是科学探索的起点，好的问题是科学研究的驱动力，也是推动突破的核心动力之一，或可能催生伟大的发现，并建议在会后将此次研讨的科学问题进一步凝练，拟推荐给中国科协作为每年遴选的十大科学问题和十大技术问题的候选内容，同时提交给基金委为十五五规划作参考。

在7月27日下午，召开了“第十届中国催化奖评选会”。评奖委员会对本届催化奖候选人材料进行了评议，最终以无记名投票方式评选出“第十届中国催化奖”获得者。（文/方堃）