

公示材料

一、项目基本情况

项目名称：二维光催化剂微纳界面调控与光生电荷分离新机制

提名者：吉首大学

提名等级：湖南省自然科学奖二等奖

主要完成人：李佑稷、李鑫、靳治良、汤森培、林晓、张海燕

主要完成单位：吉首大学、华南农业大学、北方民族大学

二、成果简介

本项目聚焦化学与化工领域的应用基础研究，针对光催化制氢及 CO_2 还原技术中存在的光生载流子分离效率低这一核心瓶颈问题，在国家自然科学基金的资助下，开创性地提出了二维材料界面工程优化电荷分离的新机制，旨在为绿氢的清洁生产及碳资源的转化提供一条全新的路径。通过发展二维氮化碳异质结高选择性 CO_2 还原、化学键合原子级界面制氢、二维 S 型异质结协同调控三大创新体系，取得国际先进原创成果。

1. 二维氮化碳异质结光催化 CO_2 高选择性还原合成高附加值化学品。研创了超紧密 2D/2D 异质结与前驱体调控热聚合构建碳氮化物基同质结的光催化剂制备新方法，发展了界面工程策略构建了具有异质和同质结构光催化剂的新策略，基于 II-型光催化系统的多电子级联还原机制可高效实现 CO_2 至 CO 的高选择性转化。阐明了超紧密二维异质结构设计如何增加活性位点，以及大面积耦合结构如何与催化性能增强和高选择性还原之间形成构效关系；揭示了通过 2D/2D 异质结界面工程优化，能够增强光生载流子的传输和分离效率的新机制。

2. 化学键合构建原子级界面增强电荷分离及高效光催化制氢。通过发展化学键合策略，精准构建了原子级的 W-N 键界面，并成功实现了 g- $\text{C}_3\text{N}_4/\text{WO}_3$ 的 Z 型异质结调控，从而在原子尺度上精确控制了电荷的分离与迁移路径。揭示了金属性 N-W 键作为高效电子传输通道，显著加速 Z 型异质结界面电子转移，提高了制氢活性。阐明 W-N 键的形成强化了材料界面相互作用，优化了界面电荷分离与传输过程，有效促进光催化

反应动力学的新机制。该成果为基于原子精度的界面调控提供了新的思路和策略，为设计高效稳定光催化制氢体系提供了理论基础。

3.二维层状 S 型异质结界面调控增强电荷分离与高效制氢研究。发展了精准设计并构建二维 S-型异质结以增强光催化析氢效率的新方法；提出二维金属-有机框架材料表面原位磷化重构金属磷化物作为电子捕获中心，并耦合半导体氧化物构建了 S-型异质结的界面工程新策略，实现半导体高氧化还原性能与催化效率；提出 2D 层状 S 型异质结和 MXene 基欧姆结协同增强电荷分离的新方法，揭示 S 型异质结的内建电场和欧姆结的低电阻特性优化界面光生电荷的分离和传输路径的新机制。

研究成果发表在 Appl. Catal. B: Environ.、ACS Catal.等国际顶级权威期刊上，6 篇代表性论文他引 849 次（其中 5 篇为高被引论文、1 篇评为中国催化学报杰出贡献奖）。科学发现 1 被国家“973”计划项目首席科学家、“国家百千万人才工程”沈晓冬教授等评价为“独特的结构加速了载流子的分离、缩短电荷传递距离，暴露更多的活性位点”；科学发现 2 被中国科学院院士郭烈锦、美国西北大学 V K. Thakur 教授等评价指出“界面化学键合的这种创新的方法创造了原子级的 W-N 键界面通道，极大地促进了电子转移，提高了电荷分离效率，缩短了电子传输距离”；科学发现 3 被欧洲科学院院士余家国、韩国科学技术院院士 Wan-Kuen Jo 高度评价称“我们的工作实现高的光催化性能”、“通过二维 CeO_2 与 Ni-MOF/P 的巧妙耦合构建 S-scheme 异质结具有重要的里程碑的意义”，并用“三个首次”高度评价科学发现。第一完成人获教育部新世纪优秀人才计划、入选全球前 2% 顶尖科学家等。项目培养湖南省优秀硕士论文 1 人，1 人获湖湘青年英才项目，1 人获省优青项目、国家级、省部级本科生学科竞赛一等奖 3 项。项目完成人在国内外学术会议上作大会或邀请报告多次。该项目极大地推动了二维材料光催化的研究和发展，特别是在二维材料层间耦合效应的研究上取得了突破，对绿氢能源和 CO_2 高值化转化研究领域具有重要意义。

三、代表作（含论文、专著）目录

序号	代表作名称/刊名/作者	年卷 页码	发表时 间	通讯作者 （含共同）	第一作 者（含 共同）	国内作者（排序）	他引总 次数	检索 数据 库	是否国 内期刊/ 国内出 版专著
1	Graphene aerogel-based NiAl-LDH/g-C ₃ N ₄ with ultratight sheet-sheet heterojunction for excellent visible-light photocatalytic activity of CO ₂ reduction/. Applied Catalysis B: Environmental/Min Yang, Peng Wang, Youji Li*, Senpei Tang*, Xiao Lin*, Haiyan Zhang, Zi Zhu, Feitai Chen*	2022, 306, 12106 5.	2022 年 1 月 21 日	李佑稷, 汤 森培、林晓、 陈飞台	阳敏	1.阳敏、2.王鹏、3. 李佑稷、4.汤森培、 5.林晓、6.张海燕、 7.朱子、8.陈飞台	217	SCIE	否
2	W-N Bonds Precisely Boost Z-Scheme Interfacial Charge Transfer in g-C ₃ N ₄ /WO ₃ Heterojunctions for Enhanced Photocatalytic H ₂ Evolution/ ACS Catalysis/Rongchen Shen, Lu Zhang, Neng Li, Zaizhu Lou, Tianyi Ma*, Peng Zhang, Youji Li, Xin Li*	2022, 12, 9994– 10003.	2022 年 8 月 2 日	李鑫, 马天 翼	沈荣晨	1.沈荣晨、2.张璐、 3.李能、4.姜在祝、 5.马天翼、6.张鹏、 7.李佑稷、8.李鑫	166	SCIE	否
3	2D CeO ₂ and a partially phosphated 2D Ni-based metal-organic framework formed an S-scheme heterojunction for efficient photocatalytic hydrogen evolution/ Langmuir/Haiming Gong, Youji Li*, Hongying	2022, 38, 2117- 2131.	2022 年 2 月 1 日	李佑稷, 靳 治良	龚海明	1.龚海明、2.李佑稷、 3.李红英、4.靳治良	92	SCIE	否

	Li, Zhiliang Jin*								
4	Homojunction type of carbon nitride as a robust photo-catalyst for reduction conversion of CO ₂ in water vapor under visible light/ Chemical Engineering Journal/Yi Yang, Yuanyuan Chen, Zhenhui Li, Senpei Tang*, Youji Li*, Zaihui Fu, Shitao Yang, Ming Yang, Haijiao Xie.	2022, 430, 13266 8.	2021 年 9 月 25 日	汤森培、李佑稷	杨毅、陈元元	1.杨亿, 2.陈园园, 3.李振辉, 4.汤森培, 5.李佑稷, 6.伏再辉, 7.杨世涛, 8.阳敏, 9.谢海娇	45	SCIE	否
5	Graphdiyne (g-C _n H _{2n-2}) based Co ₃ S ₄ anchoring and edge-covalently modification coupled with carbon-defects g-C ₃ N ₄ for photocatalytic hydrogen production/Separation and Purification Technology/Kaicheng Yang, Tianxia Liu, Dingzhou Xiang, Youji Li, Zhiliang Jin*	2022, 298, 12156 4.	2022 年 6 月 26 日	靳治良	杨凯程	1.杨凯程、2.刘天霞、3.向定周、4.李佑稷、5.靳治良	24	SCIE	否
6	Integration of 2D layered CdS/WO ₃ S-scheme heterojunctions and metallic Ti ₃ C ₂ MXene-based Ohmic junctions for effective photocatalytic H ₂ generation/ Chinese Journal of Catalysis/ Junxian Bai, RongchenShen,Zhimin Jiang, PenZhang, YoujiLi, Xin Li*	2022, 43, 359-369.	2022 年 1 月 17 日	李鑫	白浚贤、沈荣晨	1.白浚贤、2.沈荣晨、3.姜志民、4.张鹏、5.李佑稷、6.李鑫	305	SCIE	是

四、主要完成人及完成单位对项目的贡献情况

姓名	排名	行政职务	技术职称	工作单位	完成单位	对本项目贡献
李佑稷	1	院长	教授	吉首大学	吉首大学	项目第一完成人，二级教授，负责项目总体规划和指导实施。针对高效光催化的 CO ₂ 还原和制氢基础研究中前沿科学问题和重大需求，提出了从原子级水平协同调控二维催化剂的催化性能，精准调控新型二维催化剂的结构和功能的新思路（如提出了基于气凝胶骨架构筑 2D-2D 超紧密片-片异质结的新策略等），创制了系列高效二维催化剂，实现了对催化剂的结构与性能的精准调控，在新型高效二维催化剂的控制合成方法和功能调控、以及 CO ₂ 还原和产氢新方法、新机制等方面有创造性贡献。对重要科学发现 1、2、3 均做出了重要贡献，是代表性论文 1、3、4、5 的通讯作者，是代表性论文 2、6 的共同作者。
李鑫	2		教授	华南农业大学	华南农业大学	项目第二完成人，教授，发展了基于化学键合构建原子级界面的方法，有效增强了光生电荷的分离，解决了在原子尺度精准调控 Z 型异质结电荷转移路径的难题，显著提升了光催化析氢效率；提出了二维 S 型异质结与 MXene 基欧姆结协同增强电荷分离的新策略，从能带结构与界面耦合两方面协同调控，突破了单一结构在电荷分离效率上的局限，高效强化了光生电荷的分离与传输过程。该研究为构建高效、稳定的光催化系统提供了重要的理论支撑与技术路径。对重要科学发现 2、3 做出重要贡献，是代表性论文 2、6 的通讯作者。
靳治良	3		教授	北方民族大学	北方民族大学	项目第三完成人，二级教授，针对高效光催化制氢基础研究中前沿科学问题和重大需求，完成精准设计并构建二维 S-型异质结以实现催化制氢性能的多级增强机制的新方法；提出二维金属-有机框架材料表面原位磷化重构金属磷化物作为电子捕获中心，并耦合半导体氧化物构建了 S 型异质结的界面工程新策略，实现半导体高氧化还原性能与催化效率，在新型高效二维催化剂的控制合成和新机制等方面有创造性贡献。对重要科学发现 3 做出了重要贡献，是代表性论文 3、5 的通讯作者。
汤森培	4		副教授	吉首大学	吉首大学	项目第四完成人，博士研究生，副教授、负责项目的实施，针对高效光催化的 CO ₂ 还原基础研究中前沿科学问题和重大需求，提出了提出同质结能带工程与表面原子级氮修饰协同调控新策略，创制出系列新型二维同质结光催化剂。实现了对催化剂界面匹配的精准调控，

						在电荷高效分离迁移，CO ₂ 分子吸附活化与转化，协同介孔结构传质优化等方面有着创新性贡献，为高效光催化剂设计提供了理论和实践范式。该完成人是代表论性 1、4 的通讯作者。
林晓	5		讲师	吉首大学	吉首大学	项目第五完成人，博士研究生，负责项目的实施，针对高效光催化 CO ₂ 还原的前沿科学问题和重大需求，通过空间位阻和氢键作用在原子尺度上协同调控 NiAl-LDH 与 g-C ₃ N ₄ 的界面结构与电子行为，并引入石墨烯气凝胶实现多维组装与电子高速传输。构建了 NiAl-LDH/g-C ₃ N ₄ /GA 系列新型高效复合光催化剂，实现了对光生载流子分离效率、界面耦合面积和活性位点的精准调控，使 CO 产率得到显著提升，远超传统 CO ₂ 光还原水平。在超紧密异质结复合光催化剂的结构设计、性能优化以及揭示多电子串联 CO ₂ 还原新机制等方面取得了创新性突破。该完成人是代表性论 1 的通讯作者。
张海燕	6		助教	吉首大学	吉首大学	项目第六完成人，硕士研究生，负责项目的实施，基于低能耗、便捷的特点，采用简易水热法制备了石墨烯气凝胶上负载 NALDH/CN 系列异质界面，并对紧密片片界面异质进行了调控研究，同时探讨了不同条件下对 CO ₂ 还原性能进行研究。该完成人是代表性论文 1 的第六作者。