

2025 年度拟提名陕西省自然科学奖项目公示内容

一、项目名称

面向氢电集成的光催化材料与器件设计及其性能调控机制研究

二、提名者及提名意见

提名者：陕西省教育厅

提名意见：李炫华教授和余家国教授带领的合作项目团队近十年来聚焦太阳能光催化这一国际前沿热点领域，做出了多项原创性的重要科学发现，多篇成果发表在 *Science*、*Nat. Energy*、*Nat. Commun.* 等高水平期刊，获得了 10 项授权专利并进行了应用示范，对该领域的发展具有重要推动作用。围绕高效光催化材料分离调控、吸收拓展及器件集成开展研究，旨在探索太阳能同时转换为氢能和电能的氢-电集成新路径，取得如下创新成果：设计了界面强耦合的硫化物基异质结材料，激发了具有超常规量子效率的多激子效应，促进了载流子高效分离；创制了“光催化-光热”材料的原位定向生长策略，揭示了光催化材料、光热材料空间分布定向调控诱导吸收拓展机制，实现了全光谱响应；构筑了“光催化与光热氧化还原电池”多功能集成新器件，建立了催化产氢-温差发电的工作准则，实现了氢-电集成与协同增强，被 *Science* 专题评论为“引领令人激动的新路线”。整体工作层层递进，系统深入，获得了加拿大皇家科学院 Federico Rosei 院士、中国科学院吴骊珠院士等国内外学者的高度认可和广泛引用。相关研究成果前期已获得陕西高等学校科学技术研究优秀成果特等奖。培养了国家级青年人才、陕西省杰青等青年科技人才。总体来讲，该项目科学问题明确，工作系统，创新性强，对光催化材料设计及其应用转化具有突破性的科学贡献。成果材料齐全、规范，无知识产权纠纷，人员排序无争议，符合陕西省自然科学奖提名条件。

提名该项目为陕西省自然科学奖一等奖。

三、项目简介

随着新能源技术的快速发展，中国新能源产业已迈入高质量发展的新阶段。氢能和电能作为清洁能源，分别具有高能量密度、可储存和易控制、易转换等优势，其发展已从独立推进逐步走向协同融合。在此背景下，太阳能光催化分解水（又称人工光合作用）因体系简单、成本低、易规模化，被视为绿色低碳技术变革的重要突破口。进一步构筑能够同时实现太阳能向氢能与电能双重转化的新型“氢-电集成”多功能器件，不仅是突破传统光催化体系单一制氢局限的关键方式，也是推动可持续、多元化能源转型的重要路径，属于国际科技前沿问题与国家重大战略需求。当前，以金属硫化物等无机半导体为代表的光催化材料因其丰富的表面活性位点和合适的能带结构，能够高效利用紫外-可见光实现光-氢转化。

然而，金属硫化物在红外光吸收方面存在不足，制约了整体能量转化效率。光热发电效应能够利用光催化难以吸收的红外光实现光-电转化。因此，本项目团队设想耦合光催化材料与光热发电效应，构建全光谱分段利用的“氢-电集成”器件。然而，目前界面载流子易复合、光吸收不足以及器件输出能量类型单一是实现氢-电集成的挑战。**其关键科学问题在于揭示：光催化材料界面设计促进载流子分离调控机制，空间定向调控诱导全光谱协同机制，以及器件集成实现功能扩展机制等。**针对此，项目团队在国家级青年人才项目、国家自然科学基金、陕西省科技创新团队和陕西省自然科学基金计划项目的支持下，历经近十年，针对上述关键科学问题开展了深入系统研究。**总体研究思路是：**紧密围绕氢-电集成器件设计过程中的关键科学问题，聚焦典型硫化物等无机半导体光催化材料，通过强耦合界面构筑、光催化-光热材料空间定向调控、光催化产氢耦合光热发电效应等创新策略，获得了高分离、全光谱响应的产氢发电多功能氢-电集成器件，为多元化光-能转化与高效利用提供新路径。主要的研究内容、科学发现点、同行引用及评价如下：

(1) 设计了界面强耦合的硫化物基异质结光催化材料，激发了具有超常规量子效率的多激子效应，促进了载流子高效分离，解决了光催化材料内部载流子复合严重的问题。成果发表在 **Nature Energy, 2023, 8: 504; Angewandte Chemie International Edition, 2022, 61: e202209703**。获得了 Nature Energy 编辑 James Gallagher、物理学权威奖项洛伦兹奖获得者 Beard 教授、中科院理化所吴骊珠院士和邹吉军教授团队等的积极评价，认为：多激子效应在光催化领域取得了显著进展、为利用多激子效应设计高效光催化材料提供了广阔前景。

(2) 创制了“光催化-光热”复合材料体系的原位定向生长策略，揭示了光催化材料、光热材料空间分布定向调控诱导的吸收拓展机制，拓宽了光谱响应范围，解决了光催化材料面临光吸收不足的难题。成果发表在 **Nature Communications, 2021, 12: 1343; Nature Communications, 2023, 14: 1759**。获得了西安交通大学郭烈锦院士、浙江大学薄拯教授、新加坡国立大学林志群教授团队等积极评价，认为：设计的“光催化-光热”复合材料体系具有巨大的实际应用价值。

(3) 提出将光催化与光热发电效应耦合、设计构筑了“光催化-光热氧化还原电池”多功能集成器件，建立了催化产氢-温差发电的工作准则，实现了氢-电集成。成果发表在 **Science, 2023, 381: 291**。加拿大皇家科学院 Federico Rosei 院士、中国科学院邹志刚院士和国家杰青林元华教授等以 Highlights 形式评价该工作，认为：该双功能集成器件属于开创性设计，利用太阳辐射能量实现同时产氢和发电。

该项目依托国家级青年人才项目、国家自然科学基金等，基于以上创新成果，项目团队发表领域内高水平学术论文 35 篇，其中 5 篇代表性论文发表在 **Science、Nature Energy、Nature Communications (2 篇)、Angewandte Chemie**

International Edition 期刊。基于项目成果设计的高分离效率的光催化材料、全光谱响应的“光催化-光热”材料、氢电集成的“光催化-光热氧化还原电池”多功能器件，获国家授权专利 10 件，在多家企业获得应用示范。

四、客观评价

该项目围绕具有强耦合界面硫化物基异质结光催化材料、全光谱响应的“光催化-光热”复合材料、氢-电多功能的“光催化-光热氧化还原电池”集成器件设计与性能调控等三方面，进行了深入系统的研究。以相关项目成果为基础的 5 篇代表性论文被 *Science*、*Nat. Energy*、*Adv. Mater.* 等高水平期刊他引 741 次，1 篇论文他引超过 350 次。项目成果获得中国科学院院士、加拿大工程院院士等多位知名学者的广泛关注和积极评价，对相关研究有引领和示范作用。以下为代表性知名学者对项目的第三方评价摘录：

科学发现一的客观评价：项目团队设计了具有多激子效应的光催化材料，获得了超常规的量子效率，代表性论文发表在 *Nature Energy*, 2023, 8: 504; *Angewandte Chemie International Edition*, 2022, 61: e202209703。论文发表后，**Nature Energy** 资深编辑（Senior Editor）**James Gallagher** 在官网发布 News & Views 文章（*Nat. Energy*, 2023, 8, 433），评价项目团队关于多激子效应增强光催化材料工作，认为：多激子效应以前没有在光催化中报道过，项目团队的工作立即脱颖而出，这项工作迈出关键一步（...multiple exciton effects have been considered rather less in photocatalysis. This work immediately stood out as it showed ...; with this work we are a critical step closer）；物理学权威奖项洛伦兹奖获得者、美国可再生能源国家实验室 **Beard** 教授在 *Nature Energy* 期刊“Expert Opinion”评价指出：多激子效应在光催化领域的有效利用取得了显著进展（the utilization of MEG in the water-splitting process is a notable advance）。中科院理化所吴骊珠院士团队在其论文（*Nano Res.*, 2024, 17, 10259）指出：多激子效应...显著增强了光催化反应的量子产率，通过多激子效应获得了超越 100% 的内量子效率（The multiple exciton generation...greatly enhancing the quantum yield of photocatalytic reactions...An internal quantum efficiency of over 100% through the MEG effect...）。天津大学邹吉军教授发表亮点评论文章（*Sci. China Chem.*, 2024, 67, 424），认为：项目团队工作激发对光催化反应动力学决定性因素的讨论，指出了界面内建电场强度的重要性，对后续高效光催化材料设计提供了设计标准（This work also stimulates the discussion about decisive factors...and points out the important role of internal electric field...which might shed light on efficient photocatalyst design criteria）。

科学发现二的客观评价：项目团队创制了全光谱响应的“光催化-光热”复合材料，阐明了空间分布定向调控诱导的光谱吸收拓展机制，拓展了全光谱响应的光催化材料构建新策略。代表性论文发表在 *Nature Communications*, 2021, 12:

1343; Nature Communications, 2023, 14: 1759。新加坡国立大学讲席教授、林志群教授在其论文 (Adv. Mater., 2023, 35, 2210914) 中积极评价项目团队构建的“光催化-光热”材料体系, 指出: 提供了一种简单而通用的光催化材料体系设计和构建策略 (This work provided a simple yet versatile photocatalytic system design strategy for practical hydrogen ...)。西安交通大学郭烈锦院士和浙江大学薄拯教授分别在其论文 (Energy Convers. Manage., 2021, 246, 114668; Adv. Eng.Mater. 2025, 2500874) 中积极评价, 认为: “光催化-光热”材料体系具有巨大的实际应用价值 (Guo et al. designed a photothermal–photocatalytic ... which has great practical application value...)。

科学发现三的客观评价: 项目团队在“光催化–光热氧化还原电池”多功能集成器件构建方面的研究, 阐明了“催化产氢与温差发电”原位协同增强的内在机制, 发展了太阳能同时转化为氢能和电能的光–能转换新路径。代表性论文发表在 Science, 2023, 381, 291。**Science** 期刊同期发表评述文章 (perspective, Science, 2023, 381, 269), 亮点报道了项目团队的“氢–电双能源新器件”研究成果, 评价认为“在该方向迈出了第一步”、“创记录的热功率表现”、“开辟一条令人兴奋的新路线”、“提供基本器件设计原则” (marks a first step in this direction, record-high thermogalvanic performance, pioneers an exciting new route, provides essential design principles.)。加拿大皇家科学院 **Federico Rosei** 院士、清华大学国家杰青林元华教授、北京航空航天大学国家杰青赵立东教授、南方科技大学国家杰青刘玮书教授联名在 Nat. Sci. Rev., 2024, 11, nwae036 发表观点文章, 认为: 项目团队构筑了热氧化还原电池产氢发电双能源新器件 (Recently, a thermoelectric-gel-based ionic gelatin matrix was proposed to... accompanied by a simultaneous thermopower of 8.2 mV K⁻¹)。南京大学邹志刚院士团队发表亮点评论文章 (Chin. J. Struc. Chem., 2024, 43, 100195), 认为: 项目团队设计的“氢–电双能源新器件”是开创性的 (...this pioneering system combines the generation of electricity with the production of H₂...)。

五、 代表性论文专著目录

序号	论文专著 名称	刊名	作者	年卷页码	发表 时间	通讯 作者	第一 作者	国内作 者	他 引 总 次 数	检索数据 库	知识 产权 是否 归国 内所 有
1	In situ photocatalytically enhanced thermogalvanic cells for electricity and hydrogen production	Science	Yijin Wang, Youzi Zhang, Xu Xin, Jiabao Yang, Maohuai Wang, Ruiling Wang, Peng Guo, Wenjing Huang, Ana Jorge Sobrido, Bingqing Wei, Xuanhua Li	2023 年 381 卷 291 页	2023 年 07 月 21 日	Xuan hua Li	Yijin Wang	王一瑾、 张由子、 辛旭、 杨嘉宝、 王瑞玲、 郭鹏、 李炫华	92	Science Citation Index Expanded	是

2	Internal quantum efficiency higher than 100% achieved by combining doping and quantum effects for photocatalytic overall water splitting	Nature Energy	Youzi Zhang, Yuke Li, Xu Xin, Yijin Wang, Peng Guo, Ruiling Wang, Bilin Wang, Wenjing Huang, Ana Jorge Sobrido, Xuanhua Li	2023 年 8 卷 504 页	2023 年 04 月 10 日	Xuanhua Li	Youzi Zhang	张由子、辛旭、王一瑾、郭鹏、王瑞玲、王碧琳、李炫华	164	Science Citation Index Expanded	是
3	Boosting photocatalytic hydrogen production from water by photothermally induced biphasic systems	Nature Communications	Shaohui Guo, XuanhuaLi, Ju Li, Bingqing Wei	2021 年 12 卷 1343 页	2021 年 02 月 26 日	Xuanhua Li, Bingqing Wei	Shaohui Guo	郭绍晖、李炫华	356	Science Citation Index Expanded	是

4	Hydrovoltaic effect-enhanced photocatalysis by polyacrylic acid/cobaltous oxide-nitrogen doped carbon system for efficient photocatalytic water splitting	Nature Communications	Xu Xin, Youzi Zhang, Ruiling Wang, Yijin Wang, Peng Guo, Xuanhua Li	2023 年 14 卷 1759 页	2023 年 03 月 30 日	Xuanhua Li	Xu Xin	辛旭、张由子、王瑞玲、王一瑾、郭鹏、李炫华	50	Science Citation Index Expanded	是
5	Gradient heating epitaxial growth gives well lattice-matched Mo ₂ C-Mo ₂ N heterointerfaces that boost both electrocatalytic hydrogen evolution and water vapor splitting	Angewandte Chemie International Edition	Youzi Zhang, Peng Guo, Shaohui Guo, Xu Xin, Yijin Wang, Wenjing Huang, Maohuai Wang, Bowen Yang, Ana Jorge Sobrido, Jahan B. Ghasemi, Jiaguo Yu, Xuanhua Li	2022 年 61 卷 e20220970 3 页	2022 年 10 月 25 日	Xuanhua Li	Youzi Zhang, Peng Guo	张由子、郭鹏、郭绍晖、辛旭、王一瑾、余家国、李炫华	79	Science Citation Index Expanded	是
合 计									741		

六、主要完成人情况

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
李炫华	1	教育部重点实验室副主任	教授	西北工业大学	西北工业大学	项目总负责人，是项目代表作主要思想提出者，对三个重要科学发现均有创造性贡献。设计了界面强耦合的硫化物基异质结光催化材料，激发了具有超常规量子效率的多激子效应，阐明了多激子有效激发增强载流子分离机制，解决了材料内部载流子复合严重的问题。创制了具有全光谱响应的“光催化-光热”复合材料体系，揭示了光催化、光热材料空间调控实现吸收拓展机制，缓解了材料面临光吸收不足的难题。构筑了“光催化-光热氧化还原电池”多功能集成器件，建立了催化产氢-温差发电的工作准则，实现了氢-电集成，解决了输出能量单一的问题。在该项目研究中投入的工作量占本人工作总量的90%，是所有代表性论文的通讯/共同通讯作者。

张由子	2	/	/	西北工业大学	西北工业大学	<p>项目的主要参与人,对三个重要科学发现均有实质性贡献。制备了界面强耦合的异质结光催化材料,激发了多激子效应,厘清了多激子激发促进载流子分离的作用机制,缓解了材料内部载流子复合问题。参与构建了全光谱响应的“光催化-光热”材料体系,揭示了通过光催化与光热材料的空间调控实现吸收拓展机理,解决了材料光吸收不足的难题。参与构筑了“光催化-光热氧化还原电池”多功能集成器件,明晰了产氢发电协同工作准则,实现了氢电一体化输出,克服了传统体系输出能量单一的局限。在该项目研究中投入的工作量占本人工作总量的 90%, 代表性论文 2 的第一作者,代表性论文 5 的共同第一作者(排名 1), 代表性论文 1 和 4 的参与作者。</p>
-----	---	---	---	--------	--------	--

王一瑾	3	/	/	西北工业大学	西北工业大学	<p>项目的主要参与人，对三个重要科学发现均有实质性贡献。参与制备了具有界面强耦合的异质结光催化材料，激发了多激子效应，阐明了多激子有效激发促进载流子分离的作用机制，缓解了材料内部载流子复合问题。参与构建了全光谱响应的“光催化-光热”材料体系，揭示了通过光催化与光热材料的空间调控实现吸收拓展机理，解决了传统材料光吸收不足的难题。构筑了“光催化-光热氧化还原电池”多功能集成器件，建立了催化产氢与温差发电协同工作准则，实现了氢能和电能的一体化输出，突破了传统体系能量输出单一的局限。在该项目研究中投入的工作量占本人工作总量的 90%，代表性论文 1 的第一作者，代表性论文 2、4 和 5 的参与作者。</p>
-----	---	---	---	--------	--------	---

郭绍晖	4	/	讲师	太原理工大学	西北工业大学	<p>项目的主要参与人,对重要科学发现一和二有实质性贡献。参与制备了具有界面强耦合的异质结光催化材料,激发了多激子效应,阐明了多激子有效激发促进载流子分离的作用机制,缓解了材料内部载流子复合问题。构建了全光谱响应的“光催化-光热”材料体系,揭示了通过光催化与光热材料的空间调控实现吸收拓展机理,解决了传统材料光吸收不足的难题。在该项目研究中投入的工作量占本人工作总量的 70%,代表性论文 3 的第一作者,代表性论文 5 的参与作者。</p>
-----	---	---	----	--------	--------	---

辛旭	5	/	讲师	西安理工大学	西北工业大学	<p>项目的主要参与人,对三个重要科学发现均有实质性贡献。参与制备了具有界面强耦合的异质结光催化材料,激发了多激子效应,阐明了多激子有效激发促进载流子分离的作用机制,缓解了材料内部载流子复合问题。构建了全光谱响应的“光催化-光热”材料体系,揭示了通过光催化与光热材料的空间调控实现吸收拓展机理,解决了传统材料光吸收不足的难题。参与构筑了“光催化-光热氧化还原电池”多功能集成器件,建立了催化产氢与温差发电协同工作准则,实现了氢能和电能的一体化输出,突破了传统体系能量输出单一的局限。在该项目研究中投入的工作量占本人工作总量的 50%,代表性论文 4 的第一作者,代表性论文 1、2 和 5 的参与作者。</p>
----	---	---	----	--------	--------	---

余家国	6	/	教授	中国地质大学（武汉）	中国地质大学（武汉）	项目的主要参与人，对重要科学发现一有实质性贡献。参与设计制备了具有界面强耦合的异质结催化材料，阐明了界面强耦合促进载流子分离的作用机制，缓解了材料内部载流子复合问题。在该项目研究中投入的工作量占本人工作总量的 50%，代表性论文 5 的主要参与作者。
-----	---	---	----	------------	------------	---

七、主要完成单位情况

完成单位	排名	对本项目主要贡献
西北工业大学	1	西北工业大学作为完成单位。项目进行期间，主要完成人李炫华、张由子、王一瑾、郭绍晖、辛旭在西北工业大学工作、学习。项目得到了西北工业大学在人力、物力和场地方面的大力支持，保证了该项目科学计划的顺利实施。学校对项目的完成起到了组织、管理和协调的作用。学校图书馆的书籍和电子数据库是进行科学研究的重要资源，特别是在文献检索方面为项目的开展提供了良好的保障。
中国地质大学（武汉）	2	中国地质大学（武汉）为本项目完成单位，主要完成人余家国在项目执行期间在该校工作。学校在人力、物力和场地方面提供了有力支持，并在组织、管理与协调中发挥了重要作用。图书馆的数据库为科研文献检索提供了重要保障。

八、完成人合作关系说明

项目第一完成人李炫华自 2014 年一直在本研究团队工作，是第二、三、四、五完成人的研究生导师，和第六完成人长期开展科研合作。作为项目总负责人，是项目代表作及论文主要思想提出者，对三个重要发现均有创造性贡献，是所有代表性论文的通讯/共同通讯作者。

项目第二完成人张由子于 2018 年–2023 年在李炫华课题组攻读博士学位，博士毕业后继续在本研究团队开展博士后研究。是项目的主要参与者，对三个重要科学发现均有实质性贡献，是代表性论文 2 的第一作者，代表性论文 5 的共同第一作者（排名第一），代表性论文 1 和 4 的主要合作作者。

项目第三完成人王一瑾于 2019 年–2024 年在李炫华课题组攻读博士学位，博士毕业后继续在本研究团队开展博士后研究。是项目的主要参与者，对三个重要科学发现均有实质性贡献，是代表性论文 1 的第一作者，代表性论文 2、4 和 5 的主要合作作者。

项目第四完成人郭绍晖于 2015 年–2021 年在李炫华课题组攻读博士学位，博士毕业后加入太原理工大学工作。是项目的主要参与者，对重要科学发现二有实质性贡献，是代表性论文 3 的第一作者，代表性论文 5 的主要合作作者。

项目第五完成人辛旭于 2018 年–2023 年在李炫华教授课题组攻读博士学位，博士毕业后加入西安理工大学工作。是项目的主要参与者，对三个重要科学发现均有实质性贡献，是代表性论文 4 的第一作者，代表性论文 1、2 和 5 的主要合作作者。

项目第六完成人余家国教授多年来与李炫华教授开展长期科研合作，作为项目的主要参与者，对重要科学发现一有实质性贡献，是代表性论文 5 的主要合作作者。