

2026 年度拟提名陕西省自然科学奖项目公示内容

一、项目名称

太阳能光电催化分解水制氢多相界面过程调控理论与方法

二、提名者及提名意见

提名者：刘刚、西安交通大学教授、材料科学与工程。

提名意见：

发展高效低成本大规模太阳能转化与利用技术，可构建清洁低碳、安全高效的能源体系，是减少我国油气资源对外依赖、实现能源自主自立的关键战略途径。项目突破传统思维、立足学科交叉，聚焦太阳能光电催化分解水制氢多相界面反应与能量传输过程，着力突破光电催化分解水制氢的能量转化效率瓶颈，揭示了能量、物质在多相界面的光/热物理化学交互作用机制，提出了多相界面多级结构设计原则与相场协同调控策略，建立了太阳能光电催化分解水制氢多相界面过程调控理论与方法，构建了高效多相流光电催化分解水制氢体系。成果被评价为“首次报道”、“突破”、“极具参考价值”，为太阳能高效低成本制氢技术提供理论支撑。项目负责人获得国家杰出青年科学基金、中国青年科技奖，担任绿色氢电全国重点实验室副主任、中国感光学会光催化专委会副主任、中国工程热物理学会多相流分会副主任、中国可再生能源学会青年工作委员会副主任、中国可再生能源学会氢能专委会副秘书长，是国家自然科学基金杰青项目、重点项目、国家重点研发计划项目负责人。项目 5 篇代表性论文及 3 篇专著他引 2707 次。相关核心技术展示出巨大应用潜力，航天六院认为集成的空间光解水制氢地面示范样机可用于新型空间推进系统，提高飞行器的远程飞行与长期在轨运行能力；此外，光电催化体系应用于新疆等地大规模太阳能制氢示范项目，已成功实现运行，引起了广泛关注、取得显著的社会效益。

提名该项目为陕西省自然科学奖一等奖。

提名者：曹睿、陕西师范大学教授、化学。

提名意见：

“太阳能光电催化分解水制氢多相界面过程调控理论与方法”项目研究了光电催化分解水过程中多相界面能量和物质的传输与转化规律等基础科学问题。太阳能光电催化分解水制氢是一个典型的固/液/气多相流物理化学反应体系，涉及催化化学与功能材料、多相流动等学科方向的融合交叉，跨尺度作用机制复杂。以往研究集中在光电催化材料的设计与制备方面的探索，针对多相界面各环节能质传输转化损耗和调控的研究仍较欠缺。项目团队通过“微构造”和“两相共生”的催化剂结构调控、“相”与“场”调控相界面的多级结构设计、固相组织结构与液相分子离子运动特征协同调控等手段，研究了光电催化分解水过程的能质传输转化特性，揭示了能量、物质在多相界面的光/热物理化学交互作用机制，提出

了多相界面多级结构设计原则与相场协同调控策略，建立了太阳能光电催化分解水制氢多相界面过程调控理论与方法，构建了高效多相流光电催化分解水制氢体系。项目团队的研究拓展了太阳能光电催化分解水能质传输转化过程调控的基本理论和方法，相关成果处于国际领先水平，具有鲜明的原创性特点，在 *Nature Energy* 等国际期刊发表的 5 篇代表性论文及 3 篇专著他引 2707 次，得到了国内外学者的广泛关注和证明评价，并集成服务于空间推进的光解水制氢地面示范样机和应用于太阳能光热电一体化制氢系统大型示范，推动了太阳能光电催化制氢从实验室研究向工程技术实用化发展。

提名该项目为陕西省自然科学奖一等奖。

三、项目简介

太阳能光电催化分解水制氢是一项极具前景的绿氢制备技术。从“太阳—氢”的能量与物质“输入—输出”全过程来看，这是一个典型的固/液/气多相流物理化学反应体系，涉及能量与物质在多相界面的传输与转化，跨尺度作用机制复杂，能源与材料、化学等多学科交叉特征明显。以往研究多关注光电催化材料的设计与制备，并取得了较大进展；然而，“太阳能—氢能”转化过程各环节的巨大能量传输损耗导致光电催化制氢能量转化效率依然处于较低水平，离产业化应用有较大距离。本项目突破传统思维，聚焦光电催化分解水制氢多相界面传输与转化，针对“液/固—固/固—固/液/气”界面各环节能量转化损耗，通过能源与材料、化学等多学科交叉研究，着力突破光电催化分解水制氢的能量转化效率瓶颈，揭示了能量、物质在多相界面的光/热物理化学交互作用机制，提出了多相界面多级结构设计原则与相场协同调控策略，建立了太阳能光电催化分解水制氢多相界面过程调控理论与方法，构建了高效多相流光电催化分解水制氢体系，为太阳能光电催化制氢从实验室研究向工程技术实用化推进奠定了基础。主要发现点如下：

1. 揭示了多相流光电催化体系光子与液/固相界面交互作用及传输强化机制。

追溯太阳能光电催化制氢的能量源头，减小太阳光子在光电催化液/固相界面的反射损耗是实现高效光电催化制氢的前提。本项目着眼于光电催化液/固相界面光子传输过程，揭示了光子在液/固相界面的多级散射效应和分频吸收特性等光子与相界面的交互作用机制，提出液/固相界面催化剂“微构造—两相共生”协同设计理念，以“微构造”和“两相共生”分别实现光子高响应捕获和宽光谱吸收，克服了光电催化制氢体系光能反射损失大、谱学吸收范围窄的双重瓶颈；探究多相流光催化体系中颗粒团聚体的结构特征与运动规律，揭示了剪切流作用下反应液与颗粒团聚体的液/固相界面结构演化对光子传输与吸收特性的调控机制，建立了多相流光催化体系中颗粒团聚体结构特征与运动分布的流体动力学调控方法，提出了利用剪切流作用来强化液/固相界面光子传输与捕获的新思路，从源头实现了多相流光催化制氢体系对太阳能的高效吸收与利用。以剪切流优化颗粒团聚体结构与分布，实现液/固相界面光子传输调控和多重吸收，多相流光催化分解纯水体系的光子利用效率可提升 10 倍之多，达 23%，为国际同期最高

水平。成果被国际同行评价为“可有效拓展光学吸收”、“首次报道”、“突破”。项目负责人受邀撰写半导体光电催化制氢研究的英文专著章节。

2. 提出了固/固相界面相场耦合调控抑制载能子复合损耗的思路与方法。

光电催化剂内部固/固相界面的载能子复合损耗是限制光电催化制氢效率的另一主要瓶颈。本项目通过研究载能子激发行为、传输路径与固/固相界面微观结构的关联关系，揭示了固/固相界面“电子—空穴”激子束缚、“光/热电子—空穴—热声子”平衡输运等载能子耦合传输特性，提出了以相界面“相”与“场”调控实现载能子定向传输与非平衡输运、抑制载能子复合损耗的思路与方法。从分子水平对固/固相界面的“相”结构进行精准设计，构筑固/固相界面光生电子定向传输通道，打破“电子—空穴”激子束缚，减少载能子复合能量损耗；建立了固/固相界面结构特征模型与设计原则，提出了多级固/固相界面“相”与“场”协同调控驱动载能子高效低阻传输的新思路，发展了具有一定普适性的多级固/固相界面构建策略，解决了固/固相界面载能子传输阻力大的难题，光电转换效率接近 90%。成果被国际同行评价为“有效、实用的策略”、“极具参考价值”，获得了“引人注目的太阳能制氢效率”。项目负责人获中国青年科技奖、国际先进材料协会科学家奖，受邀在国际先进材料年会作获奖演讲。

3. 构建了固/液/气多相界面过程跨尺度调控理论及高效光电催化制氢体系。

“固/液/气”三相界面能质转化速率低是制约高效光电催化制氢的动力学瓶颈，以往研究忽略了多种载能子协同转变对能质传输与转化过程的影响。本项目密切关注固/液/气多相界面反应与传输的跨尺度过程与特征，揭示了固/液相界面“相—载能子”协同转变机制，从热力学角度证实了相界面“相—载能子”协同转变可减小固/液相界面化学反应活化能，发展了固/液相界面处固相组织结构与液相分子离子运动特征协同调控克服载能子传输势垒的新方法，大幅提高光电催化性能；针对固/液相界面气相产物的生成与脱附，揭示了纳米气泡“注入效应”控制的气泡生长机制和气体产物迁移路径，提出了基于气泡生长的固/液/气三相界面的光、热、流动多物理场模型；发现光热 Marangoni 对流强化的气泡生长局部物质传递，发展了微纳结构设计促进氢气泡生长与脱附的物质传输强化以克服固/液相界面传质瓶颈的新方法，建立了电子/空穴、离子/分子、气泡等载能子与物质的多相界面过程跨尺度传输与协同转化调控理论，光—氢能量转化效率达 17.8%。成果被同行评价为发现了“光电催化过程中反应主导的气泡生长”机理、“导出了气泡生长过程的传质关联式”、“显著提升了光电催化活性”，并被国际光学工程学会官网 Newsroom 给予系列专门报道，产生重要国际影响。

在 Nature Energy 等国际期刊发表 SCI 检索论文 190 余篇，参编英文专著 2 部，参与制定国家标准 1 项，项目 5 篇代表性论文及 3 篇专著他引 2707 次。项目负责人获得国家杰青项目资助，获中国青年科技奖，任绿色氢电全国重点实验室副主任、中国感光学会光催化专委会副主任、中国工程热物理学会多相流分会副主任、中国可再生能源学会青年工作委员会副主任、中国可再生能源学会氢能专委会副秘书长，是国家自然科学基金杰青项目、重点项目、国家重点研发计划

项目负责人。项目先后获得国家重点研发计划及国家自然科学基金面上/国际合作/专项基金等项目联合资助，形成的多相界面过程调控理论与方法用于构建光催化分解水制氢体系，光-氢能量转化效率达 1.16%，为同类颗粒悬浮光催化体系国际最高水平，打破了日本 Domen 教授保持多年的世界纪录。成功构建了高效光电催化分解水制氢体系，并集成服务于空间推进的光解水制氢地面示范样机，满足 1 N 卫星推进与变轨需求；应用于太阳能光热电一体化制氢系统，由中国可再生能源学会组织的包括 7 位院士的专家组一致评价为“达到国际领先水平”，在国家电投新疆公司进行年产 50 万方氢的大型示范，受到多国院士学者和国家重点单位的高度评价，引起广泛关注，展示出巨大的应用潜力。

四、客观评价

5 篇代表性论文发表于 Nature Energy、Advanced Materials、ACS Catalysis 等能源、材料、化学领域国际著名期刊，参编英文专著 3 部，代表性论文和专著被中、英、美、德、日、韩、瑞典等国内外著名学者他引 2707 次。成果受到多国院士学者和国家重点单位的高度评价，产生了广泛的学术影响和显著的社会效益。以下为国内外知名学者及业界的第三方代表性评价摘录。

1. 发现点 1 代表性评价：光子与液/固相界面交互作用及传输强化“可有效拓展光学吸收”、“首次报道”、“突破”。

[1] 美国总统奖获得者、德克萨斯奥斯汀分校 Buddie Mullins 教授在 Chem. Soc. Rev. (IF=48.3) 论文中正面评价本项目工作“拓展了可见光吸收 (extended visible light absorption)”、“报道了 27% 的光子利用效率”。

[2] 美国国家工程院外籍院士、新加坡国立大学 Bin Liu 教授在 Energy Environ. Sci. (IF=30.5) 论文中评价本项目发展的方法“拓展了光学吸收 (extended optical absorption)”。

[3] 中科院院士、华东理工大学田禾教授在 Appl. Catal. B (IF=19.7) 论文中指出相关界面调控方法是“沈等人首次报道 (firstly reported)”。

[4] 欧洲科学院院士、日本国立材料研究所叶金花教授在 Adv. Mater. (IF=29.1) 论文中将本项目工作列为光催化材料界面调控的标志性成果，评价为“显著地促进了 (significantly promoting) 光生载能子迁移”。

[5] 中科院院士、华南理工大学曹镛教授在 ACS Sustain. Chem. Eng. (IF=7.6) 论文中指出，本项目发展的固/固相界面调控策略可“大幅降低 (largely reduce) 能量损失和激子复合”。

[6] Cell 出版社 Matter (IF=15.7) 期刊发表专题长文对本项目成果进行评述，并高度评价为“一项突破 (a breakthrough)”。

2. 发现点 2 代表性评价：固/固相界面相场耦合调控抑制载能子复合损耗的方法为“有效、实用的策略”、“极具参考价值”。

[1] 欧洲科学院院士、德国汉诺威莱布尼兹大学 Detlef Bahnemann 教授在 J. Phys. Energy (IF=5.7) 发表论文总结光催化制氢发展路线，将本项目研究成果列为光催化分解水体系的“高效率 (high STH efficiency)”代表性研究工作。

[2] 中科院和基金委共同主办的《中国科学·化学》(英文版, IF=9.8) 期刊专门发表亮点 (Highlights) 论文评述本项目成果, 为“显著进展 (significant progress)、处于最高水平 (standing at the highest level)、引人注目的太阳能制氢效率 (remarkable STH value)”。

[3] 中国科学院院士、北京大学刘忠范教授与欧洲科学院外籍院士、香港城市大学张华教授等著名学者联合发表在《物理化学学报》(IF=13.5) 的综述论文中重点评述本项目相关方法为“有效的 (efficient)、实用的策略 (a practical strategy)”。

[4] 中国科学院院士、中国科学技术大学副校长/同济大学校长杨金龙教授在《物理化学学报》(IF=13.5) 期刊专门撰写 Highlights 论文点评本项目研究工作, 评价为“极具参考价值、为太阳能的高效转化及利用提供了可借鉴的新思路”。

[5] 瑞典皇家工程院院士、瑞典皇家工学院/西湖大学孙立成教授在 J. Am. Chem. Soc. (IF=16.6) 论文中正面评价本项目提出的相结构精准设计方法, 可获得“优异 (excellent) 光催化性能”。

3. 发现点 3 代表性评价: 固/液/气多相界面过程跨尺度调控“显著提升光催化活性”, 发现了“光电催化过程中反应主导的气泡生长”机理。

[1] 英国伦敦大学学院 Andrew Beale 教授在 Chem. Soc. Rev. (IF=48.3) 论文中以单独段落图文总结本项目提出的“相-载能子”协同转变机制, 并指出可使“光催化活性提升 75%”。

[2] 中科院院士、南京大学邹志刚教授在 ACS Catal. (IF=13.6) 研究论文中以本项目“相-载能子”协同转变机制作为其机理分析的重要依据。

[3] 瑞士洛桑联邦理工学院 Sophia Haussener 教授在 ChemSusChem (IF=5.9) 论文中正面评价本项目研究工作“基于助催化作用强化空穴注入过程, 显著提升光催化活性”。

[4] 韩国国家材料实验室主任 Young Soo Kang 教授在 Nanoscale (IF=5.2) 论文中指出, 郭(关)等人构建的光催化体系基于“光生空穴快速迁移, 实现了双活性位点产氧”。

[5] 美国康奈尔大学 Carlos D. Díaz-Marín 教授在 Chem. Rev. (IF=64.2) 论文中明确指出, “王等研究了光电催化的气泡生长”, “发现了光电催化过程中反应主导的气泡生长 (reaction-controlled growth)”机理。

[6] 韩国成均馆大学 Wooseok Yang 教授在 ACS Energy Lett. (IF=17.5) 论文中评价本项目研究工作“揭示了光电催化气泡生长机理 (gas bubble growth mechanism)”、“证实了 (support) 不同气泡生长模式取决于气泡和电极尺寸相对大小的概念 (concept)”。

[7] 德国亥姆霍兹德累斯顿罗森道夫研究中心 Kerstin Eckert 教授在 J. Colloid Interf. Sci. (IF=9.6) 论文中强调, “王等人导出了 (derived) 气泡生长过程中气液相界面的传质关联式 (derived mass transfer correlations)”。

4. 项目总体创新性的第三方评价

[1] 国际光学工程学会（SPIE）在其官网 Newsroom 上给予系列专门报道，评价本项目团队研究成果为“高效的光电催化分解水体系”。

[2] 以本项目构建的光电催化分解水制氢体系集成了面向空间推进系统的光解水制氢地面示范样机，可满足 1 N 卫星的推进与变轨需求，航天六院认为“有望实现空间在轨制氢，解决空间氢氧无法长期存储的难题，提高飞行器的远程飞行与长期在轨运行能力”。

[3] 本项目构建的光电催化分解水制氢体系应用于太阳能光热电一体化制氢系统，在国家电投新疆公司开展年产 50 万方氢的大型示范，由中国可再生能源学会组织的包括 7 位院士的专家组一致评价为“国际领先水平”。

五、代表性论文专著目录（不超过 8 条，其中代表性论文不超过 5 篇，代表性专著不超过 3 部）

序号	论文专著 名称	刊名	作者	年卷页码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	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	Boron-doped nitrogen-deficient carbon nitride-based Z-scheme heterostructures for photocatalytic overall water splitting	Nature Energy	Daming Zhao, Yiqing Wang, Chung-Li Dong, Yu-Cheng Huang, Jie Chen, Fei Xue, Shaohua Shen, Liejin Guo	2021 年 6 卷 388-397 页	2021 年 3 月 22 日	Shaohua Shen	Daming Zhao, Yiqing Wang	赵大明, 王亦清, 陈杰, 薛飞, 沈少华, 郭烈锦	1234	WOS	是

2	Synergy of dopants and defects in graphitic carbon nitride with exceptionally modulated band structures for efficient photocatalytic oxygen evolution	Advanced Materials	Daming Zhao, Chung-Li Dong, Bin Wang, Chao Chen, Yu-Cheng Huang, Zhidan Diao, Shuzhou Li, Liejin Guo, Shaohua Shen	2019 年 31 卷 1903545 页	2019 年 10 月 25 日	Shaohua Shen	Daming Zhao	赵大明, 王斌, 刁志丹, 郭烈锦, 沈少华	913	WOS	是
3	Molecular design of polymer heterojunctions for efficient solar-hydrogen conversion	Advanced Materials	Jie Chen, Chung-Li Dong, Daming Zhao, Yu-Cheng Huang, Xixi Wang, Leith Samad, Lianna Dang, Melinda Shearer, Shaohua Shen, Liejin Guo	2017 年 29 卷 1606198 页	2017 年 6 月 6 日	Shaohua Shen	Jie Chen	陈杰, 赵大明, 王熙熙, 沈少华, 郭烈锦	246	WOS	是

4	Cocatalytic Effect of SrTiO ₃ on Ag ₃ PO ₄ toward Enhanced Photocatalytic Water Oxidation	ACS Catalysis	Xiangjiu Guan, Liejin Guo	2014 年 4 卷 3020-3026 页	2014 年 9 月 1 日	Lie jin Gu o	Xian gjiu Gua n	关祥久, 郭烈锦	184	WOS	是
5	Investigations on bubble growth mechanism during photoelectrochemical and electrochemical conversions	Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects	Yechun Wang, Xiaowei Hu, Zhenshan Cao, Liejin Guo	2016 年 505 卷 86-92 页	2016 年 9 月 20 日	Xia ow ei Hu , Lie jin Gu o	Yech un Wan g	王晔春, 胡晓玮, 曹振山, 郭烈锦	47	WOS	是
6	Water Photo- and Electro-Catalysis: Mechanisms, Materials, Devices, and Systems	Wiley	Shaohua Shen, Shuangyin Wang	2024 年 978-3-527-34835-0	2024 年 3 月 1 日		Shao hua Shen	沈少华, 王双印	12	WOS	是

7	Semiconducting Photocatalysis for Solar Hydrogen Conversion	Nanomaterials for Energy Conversion and Storage	Shaohua Shen, Jie Chen	2018 年 ISBN9781786343628 第 2 章 63-108 页	2018 年 1 月 1 日		Shao hua Shen	沈少华, 陈杰	27	WWOS	是
8	Rational Heterostructure Design for Photoelectrochemical Water Splitting	Multifunctional Nanocomposites for Energy and Environmental Applications	Shaohua Shen, Meng Wang, Xiangyan Chen	2018 年 ISBN9783527342136 第 16 章 467-526 页	2018 年 3 月 19 日		Shao hua Shen	沈少华, 王蒙, 陈向艳	44	WOS	是
合 计									2707		

六、主要完成人情况（不超过 6 人）

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
沈少华	1	无	教授	西安交通大学	西安交通大学	重要科学发现点 1、2、3 主要学术思想的提出者，代表性论文 1、2、3 的通讯作者，代表性专著 6、7、8 的第一作者。主持并指导项目组围绕核心目标和科学问题持续开展系统深入的研究工作。揭示了多相流光电催化体系中光子与液/固相界面交互作用及传输强化机制，提出了固/固相界面相场耦合调控抑制载能子复合损耗的思路与方法，构建了固/液/气多相界面过程跨尺度调控理论及高效光电催化制氢体系。
关祥久	2	无	副研究员	西安交通大学	西安交通大学	对本项目的主要贡献在于重要发现点 2、3，代表性论文 4 的第一作者。协助项目第一完成人指导项目组围绕核心目标和科学问题持续开展系统深入的研究工作。深入研究了固/固相界面结构调控抑制载能子复合损耗和强化物质转化的微观机制，对多相界面过程跨尺度调控理论的形成起到重要作用，对理论的实践、系统的工程化研究起到核心支撑作用。

陈杰	3	无	教授	西安交通大学	西安交通大学	对本项目的主要贡献在于重要发现点 1、2，代表性论文 3 的第一作者。深入研究了光子与液/固相界面交互作用机制及固/固相界面载能子传输机制，对多相界面过程跨尺度调控理论的形成起到核心支撑作用。
赵大明	4	无	副教授	中山大学	西安交通大学	对本项目的主要贡献在于发现点 1、2，代表性论文 1、2 的第一作者。深入研究了液/固相界面及固/固相界面载能子传输及交互作用机制，提出了材料微结构调控方法。
王亦清	5	无	讲师	西安交通大学	西安交通大学	对本项目的主要贡献在于发现点 2，代表性论文 1 的共同第一作者。深入研究了固/固相界面相场耦合调控抑制载能子复合损耗的微观机制，提出了电荷传输调控方法。
王晔春	6	无	高级工程师	西安交通大学	西安交通大学	对本项目的主要贡献在于发现点 3，代表性论文 5 的第一作者。深入研究了气泡生长和气体产物迁移的微观机制，提出了气泡生长模型。

七、主要完成单位情况（不超过 3 个）

完成单位	排名	对本项目主要贡献（限 600 字）
西安交通大学	1	创建了太阳能光电催化分解水制氢多相界面过程调控理论并完成了理论验证。指导项目组围绕核心目标和科学问题持续开展系统深入的研究工作。揭示了多相流光电催化体系中光子与液/固相界面相互作用及传输强化机制，提出了固/固相界面相场耦合调控抑制载能子复合损耗的思路与方法，构建了固/液/气多相界面过程跨尺度调控理论及高效光电催化制氢体系。

八、完成人合作关系说明

项目第 1 完成人为代表性论文 1、2、3 的通讯作者及代表性专著 6、7、8 的第一作者。

项目第 2 完成人协助本人指导研究生，与本人有论文合著、共同立项、共同获奖、共同参与制定标准规范，为代表性论文 4 的第一作者。

项目第 3 完成人协助本人指导研究生，与本人有论文合著，为代表性论文 3 的第一作者及代表性专著 7 的核心作者。

项目第 4 完成人为本人博士研究生毕业，与本人有论文合著，为代表性论文 1、2 的第一作者。

项目第 5 完成人为本人博士研究生毕业，与本人有论文合著，为代表性论文 1 的共同第一作者。

项目第 6 完成人与本人有论文合著及共同立项，为代表性论文 5 的第一作者。