



中国科学院特别研究助理资助项目 申 请 书

申请人姓名： 刘利芳

聘 用 单 位： 中科院大连化学物理研究所

(拟) 到岗工作时间： 2024 年 03 月

研 究 方 向： 太阳能光催化转化

所属一级学科： 化学

填表日期： 2025 年 04 月 28 日

中国科学院人事局 2019 年制表

一、个人信息

(一) 基本信息					
姓 名	刘利芳		性 别	女	
婚姻状况			出生年月		
移动电话			国 籍	中国	
有效证件名称			证 件 号		
通讯地址			电子邮箱		
博士毕业院校/科研机构	中国科学院大学/中科院大连化学物理研究所		获 博 士 学位时间	2024 年 01 月	
博士后信息 (新进站博士后填写)	博士后编号		合作导师	刘生忠	
	进 站 时 间	2024 年 02 月	进站一级学科	化学	
(二) 主要学习/工作经历					
注：学习经历从本科阶段填起；工作经历包括在国内外机构访问、进修等。					
学 习 经 历	起止时间	院校/科研机构	国别	专业	学历
	2017-2024	中科院大连化物所	中 国	物 理 化 学	研 究 生
	2013-2017	郑州大学	中 国	化 学	本 科
工 作 经 历	起止时间	院校/科研机构	国别	研究方向	工作岗位
	2024-至今	中科院大连化物所	中 国	太阳能光催化转化	博 士 后

如内容较多，本栏目填不下时，可另附纸接续（以下各栏目均如此）。

（三）学术及科研情况

1. 代表性论文（5 篇以内）

注：“作者排序”中，如为通讯作者请填写“C”。

题目	刊物/会议名称	发表时间	作者	卷期、页	影响因子	引用情况
Water-stable nickel metal-organic framework nanobelts for cocatalyst-free photocatalytic water splitting to produce hydrogen	Journal of the American Chemical Society	2022	1	3(4), 449-460	15.0	ESI 全球 TOP 1% 高被引, 引用 159 次
Saturated Ti-coordinated {001} facets-dependent photocatalytic water reduction over NH ₂ -MIL-125(Ti) sheets: Observation and unraveling of facets effect	Applied Catalysis B-Environment and Energy	2023	1	338, 123094	22.4	引用 22 次
One-dimensional nanotube of metal-organic framework boosts charge separation and photocatalytic hydrogen evolution from water: synthesis and underlying understanding	EES Catalysis	2024	1	2, 789-794	/	引用 2 次
Facets-Controllable Synthesis of Metal - Organic Frameworks via One Supersaturation Strategy to Insight Intrinsic Facets Effect	Chinese Journal of Catalysis	2025	1	Accepted	15.7	/
Band gap engineering of metal-organic frameworks for solar fuel productions	Coordination Chemistry Reviews	2021	2	2435, 213785	20.6	94

2. 主持（参与）的国家或省部级项目/课题（5项以内）

注：①“起止时间”精确到月；②“项目/课题属类”请填写该项目的归属，如国家自然科学基金、国家重大科技专项、国家重点研发计划等；③“承担角色”请填写主持、参与等。

项目/课题名称	起止时间	项目/课题属类	下达部门	项目经费（万元）	承担
电催化选择性还原 CO ₂ 至 C ₂ +产物的新型导电 MOFs 催化剂设计合成与性能研究	2023.01-2026.12	国家级项目	国家自然科学基金委员会	100 万	参与人
水相稳定宽光谱捕光金属-有机框架的制备及光解水制氢研究	2020.01-2022.12	国家级项目	国家自然科学基金委员会	25 万	参与人
新型有机无机杂化材料光化学能源转化研究	2020.01-2022.12	国家级项目	中国科学院国际伙伴计划资助	98 万	参与人

3. 出版专著情况（3项以内）

专著名称	出版时间	出版社	作者排序

4. 申请和已取得专利情况（5项以内）

专利名称	类型	授权时间	批准国家	授权编号	申请人排序
P-型卟基金属有机框架单晶材料及纳米带的制备方法和应用	发明专利	2021-11-23	中国	ZL202111396878.8	2
一种含 Co ₄ O ₄ 准立方烷结构的钴基金属有机框架化合物的制备方法及应用	发明专利	2020-04-27	中国	ZL202010345578.6	3

5. 奖励情况（5 项以内）					
奖励名称	获奖时间	授予单位			获奖人排名
博士研究生国家奖学金	2023	中华人民共和国教育部			
岛津企业奖学金	2023	中科院大连化学物理研究所			
中国科学院大学三好学生	2021	中国科学院大学			
郑州大学一等奖学金	2016	郑州大学			
国家励志奖学金	2015	河南省教育厅			

二、拟开展的研究工作

(一) 研究工作基本情况	
研究方向	太阳能光催化转化
所属领域	
(二) 研究基础	
注：填写目前已从事或具备的基础工作，不超过 1000 字。	
申请人在硕博期间一直从事 MOFs 材料的设计合成与光催化分解水制氢研究，在新型 MOFs 设计和控制合成、功能调变、电荷传输与光催化分解水制氢反应性能提升方面积累了充足的经验。申请人以第一作者在 J. Am. Chem. Soc. (ESI 全球 TOP 1% 高被引论文)、Appl. Catal. B-Environ Energy.、Chinese J. Catal. 和 EES Catal. 发表学术论文 4 篇，以其他作者身份发表论文 10 篇，授权专利两项。代表性研究工作简介如下： (1) 新型 Ni-TBAPy-NB 的设计合成与分解水制氢研究 通过选择光敏性的 H₄TBAPy 配体为捕光中心，与 [Ni₃O₁₆]³⁺ 节点的产氢催化中心构筑新型的 MOFs 单晶 (Ni-TBAPy-SC) 光催化剂，将 Ni-TBAPy-SC 超声剥离形成 2D 纳米带 (Ni-TBAPy-NB)，得益于捕光中心和催化中心的结合、2D 纳米带结构、MOF 框架结	

构, Ni-TBAPy-NB 在无助催化剂负载下的光催化分解制氢表观量子效率(AQE)达到 8.0% (420 nm), 是报道当时水相稳定本体 MOFs 光催化制氢的最高值 (图 1a, *J. Am. Chem. Soc.*, 2022, 144, 6, 2747–2754)。

(2) MOFs 类光催化剂的电荷分离和分解水制氢活性具有晶面依赖性

以具有可见光响应的 NH₂-MIL-125(Ti) 明星 MOF 光催化材料为研究模型, 控制合成了一系列不同 {001}/{111} 晶面暴露比例的 NH₂-MIL-125(Ti) 片, 发现其光催化分解水制氢半反应活性高度依赖于暴露 {001} 晶面比例, 并利用理论计算和多种表征技术等揭示了其背后的结构影响本质, 发现具有丰富饱和配位 Ti 原子 (Ti_{6c}) 的 {001} 晶面更有利于捕获和传递光生电子, 进而促进电荷分离。该工作证实了 MOFs 类光催化材料晶面微观结构对其光生电荷分离具有显著影响, 还表明利用低指数晶面构筑高效 MOFs 类光催化制氢体系的可行性 (图 1b, *Appl. Catal. B-Environ Energy*, 2023, 338, 123094)。

(3) 1D Mn-TBAPy MOF 纳米管结构的控制合成与分解水制氢研究

首次合成了良好可见光吸收、水相稳定的 1D MOF 纳米管 Mn-TBAPy-NT, 并将其应用于光催化分解水产氢 AQE 达到 11.7%, 是当时报道水相稳定 MOFs 光催化剂的最优值。该工作阐明了纳米管的应力效应是促进电荷分离和光催化性能的主要原因 (图 1c, *EES Catal.*, 2024, 2, 789-794.)。

(4) 基于过饱和策略的 MOFs 晶面可控合成用于理解本征晶面效应

通过一种无封端剂的简单过饱和策略合成方法, 以 {001}、{111} 和 {100} 晶面暴露的 NH₂-MIL-125(Ti) MOFs 作为模型光催化剂, 从而对其无封端剂干扰的本征晶面效应进行了概念验证, 研究表明传统晶面控制合成路线中封端剂不可避免的残留或影响, 导致局部表面结构环境改变以及电荷分离特性显著不同 (图 1d, *Chinese. J. Catal.*, 2025, accepted)。过往研究中晶面效应结论的相互矛盾性, 本质源于合成过程封端剂的干扰作用, 本工作建立的无封端剂干扰的晶面调控体系为揭示真实晶面功能差异提供了研究范式。

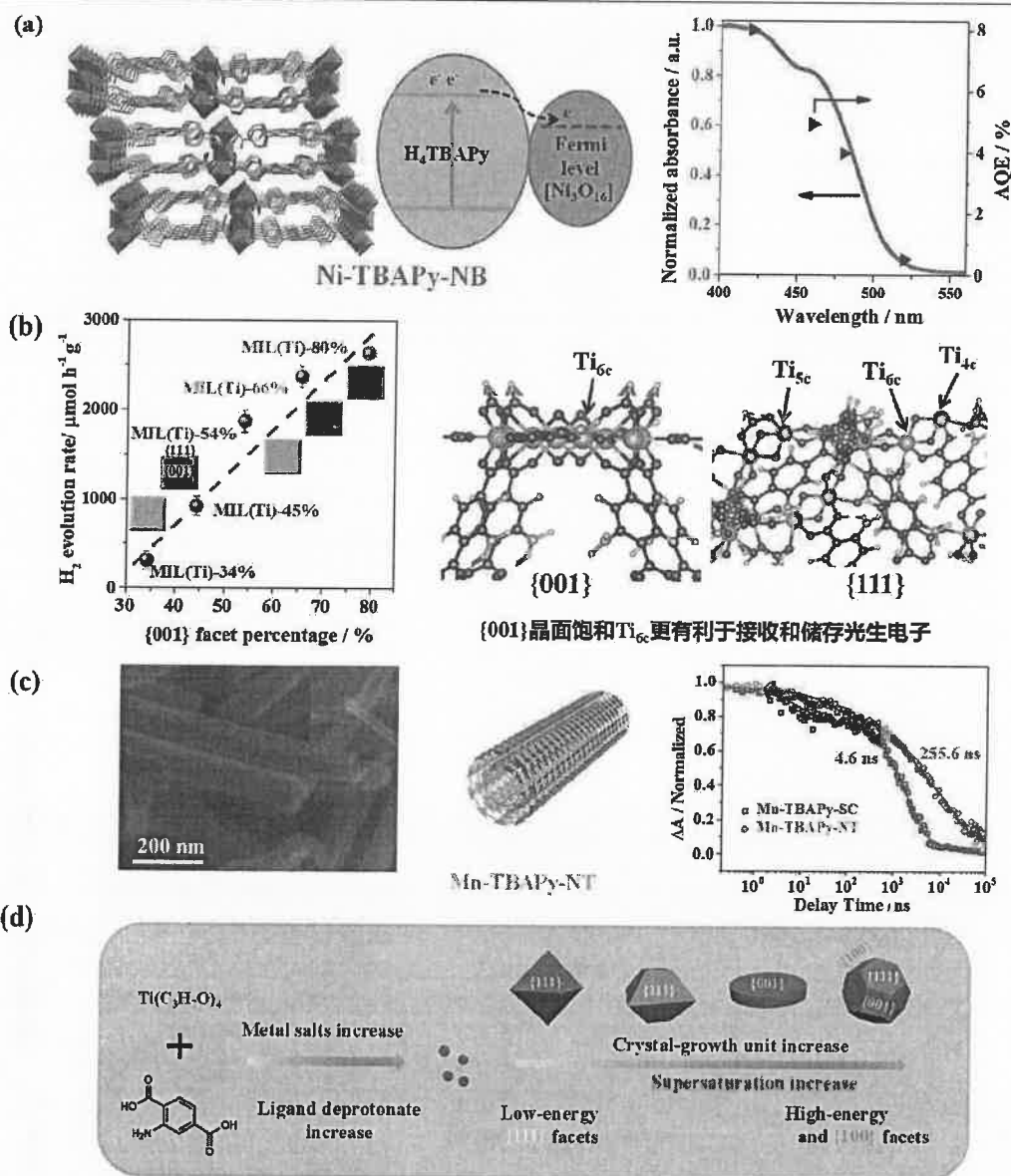


图 1. (a) Ni-TBAPy-NB 结构和产氢 AQE, (b) 不同晶面暴露的 NH₂-MIL-125(Ti)性能和原子结构, (c) Mn-TBAPy-NT 纳米管形貌和载流子动力学和 (d) 过饱和度调控的策略控制合成不同晶面暴露 NH₂-MIL-125(Ti)的示意图。

(三) 主要目标

注：填写开展研究工作拟解决的科学问题或对所属学科领域产生的推动作用，不超过 500 字。

开发清洁、可再生的能源技术是国家的重大战略需求，对于解决能源短缺和环境污染问题意义重大。将太阳能转化为化学燃料的半导体光催化技术是一种绿色、可持续的能源转换技术，氢能作为一种理想的太阳能储能载体。高效、稳定的分解水制氢光催化剂的合成与性能提升是实现太阳能高效转化与利用的关键，对推动清洁能源技术的发展具有重要意义。

研究工作聚焦太阳能光催化分解水制氢领域的关键挑战，从光催化高效分解水所需的材料出发，针对传统二维（2D）纳米材料合成中使用调节剂引起微纳结构不均一和调节剂残留等导致“构效关系”认识不清晰、光催化剂载流子分离效率低等关键科学难题，基于可见光相应的 2D 卟基金属有机框架（MOFs）光催化剂模型，拟以溶剂热为基础，系统研究无任何调节剂存在下 2D 卟基 MOFs 纳米片的合成，考察其表面微纳结构对载流子分离、表面催化动力学和光催化性能等影响规律，结合理论模拟、先进原位表征等明晰此类光催化剂微纳结构与性能之间的“构效关系”，提升反应机理认识，并与传统调节剂存在下合成的 2D 材料进行对比，最终指导构筑出光催化分解水产氢量子效率国际领先的 MOFs 基光催化分解水体系。

本项研究对于突破目前光催化分解水反应的发展瓶颈具有重要意义，有望带来太阳能转化效率的突破，而高效光催化体系的构建也将加快工业化应用的进程。

(四) 研究计划

注：不超过 1000 字。

研究内容

本研究工作以层状结构的卟基 MOFs M-TBAPy（M=Mn、Co、Cd、Ni）为研究对象，采用溶剂热方法进行二维（2D）卟基 MOFs 纳米片（M-TBAPy-NS）的无调节剂合成，通过电子学分析、光谱学表征和理论模拟手段解析 2D MOFs 纳米片的生长机理。进一步将其应用于可见光催化分解水体系，研究 2D 纳米片的微纳结构对其物理化学性质和光催化性能的影响规律。通过先进的表征技术深入探究此类材料微纳结构与光催化性能的“构效关系”，并与有调节剂合成的 2D 纳米片进行对比分析。最终基于卟基 MOFs 纳米片构筑高效光催化分解水体系，以期在表观量子效率上达到国际领先。

具体研究内容如下：

(1) M-TBAPy-NS MOFs 的合成和生长机理研究

选取 1,3,6,8-四(对苯甲酸)芘 (H_4TBAPy) 配体的层状结构 MOFs ($M-TBAPy$, $M=Mn$ 、 Co 、 Cd 、 Ni), 采用溶剂热方法, 通过控制反应温度、反应物浓度、反应时间和升降温速率调控配位成键过程和生长速率, 通过调节溶剂种类和比例控制 MOFs 生长取向, 制备 2D MOFs 纳米片。观察 MOFs 形貌尺寸和厚度, 结合 XRD、IR 光谱和理论模拟等分析生长过程, 解析 2D MOFs 纳米片的生长机理, 阐明合成条件对 2D 纳米片形貌尺寸和厚度的影响规律, 建立 2D MOFs 纳米片合成的普适策略, 并推广到其他 MOFs 材料。

(2) M-TBAPy-NS MOFs 物化性质研究

在合成 2D MOFs 纳米片的基础上, 对其光电性质进行表征。研究不同金属节点的 MOFs 能带结构、载流子寿命、比表面积、稳定性等性质, 考察 2D MOFs 纳米片光吸收、载流子分离以及表面催化反应的能力。

载流子分离和传输过程是光催化反应性能的关键影响因素, 利用先进的表征技术对 2D 纳米片中载流子的传输过程进行重点研究, 探究 2D 结构对载流子寿命等光物理性质的影响, 阐明 2D 结构对载流子动力学影响的原因。

(3) M-TBAPy-NS MOFs 光催化分解水性能与机制研究

基于研究内容(2)的结果, 选取具有较好光电性质的 M-TBAPy-NS, 之后通过构建光催化可见光催化分解水制氢体系, 初步分析讨论 M-TBAPy-NS 结构在可见光催化分解水性能的作用规律。分析 M-TBAPy-NS 中光生载流子的迁移分离过程和表面反应动力学, 并结合先进的原位 XAS、XPS、IR、Raman 等谱学表征技术系统研究结构和性能之间的“构效关系”。并通过与传统调节剂存在下合成的 2D 纳米片材料进行对比, 分析两者在局域微纳结构上的差异及其对性能的影响, 揭示制约性能的关键因素, 提升反应机理认识, 为高效光催化剂的设计提供理论基础。

基于对“构效关系”的认识, 进一步优化合成出良好可见光吸收、载流子分离和表面反应的 MOFs 光催化剂, 通过芘基配体的官能团化修饰和金属位点的替换等策略调控光吸收和能带结构, 通过选择不同金属离子或者合成双金属节点调控 MOFs 中配体到金属的电荷转移 (LMCT) 过程, 通过将分子催化剂、单原子催化剂整合到配体上或者通过 LMCT 过程将金属助催化剂原位光沉积到 2D 纳米片上, 实现高效光催化分解水性能。

三、申请人承诺

本人郑重承诺：

以上信息均真实、准确；本人自愿承担因上述信息不实造成的一切后果。
入选后，本人将严格遵守相关管理规定。

申请人签字： 刘利芳

2025 年 05 月 06 日