

姓名	顾竞	性别	女	出生年月	1984年4月21日	
出生地	贵州	婚姻状况	已婚	政治面貌	群众	
国籍	中国	从事专业	太阳能光电化学转换			
现工作单位及职位	美国新能源国家实验室博士后					
人事关系所在单位	贵州省贵阳市人才交流服务中心					
<p>学习及工作经历：</p> <p>（从大学开始填，内容包括时间、单位、学位、所学专业、从事专业、专业技术职务情况，时间段要连续，准确到月份）</p> <p>2002年9月—2006年5月</p> <p>学位：学士 专业：应用化学 单位：武汉大学 主要研究领域：新型主链含铈配合物共轭高分子材料的合成及性能研究</p> <p>2006年8月—2011年8月</p> <p>学位：博士 专业：光化学 单位：杜兰大学 主要研究领域：钕和钷含氧感知器和激光限制性材料的开发和电子传递机理的研究</p> <p>2011年8月—2013年8月</p> <p>经历：博士后 专业：物理化学，材料化学 单位：普林斯顿大学 主要研究领域：光电氧化物用作人工光合分解水制氢和光合转化二氧化碳</p> <p>2013年8月—至今</p> <p>经历：博士后 专业：物理化学，材料化学 单位：美国新能源国家实验室 主要研究领域：分子催化和半导体杂化材料的开发使光催化的效率和稳定性提高</p>						

如内容较多，本栏目填不下时，可另纸接续（下同）。

主要学术成就、科技成果及创新点：

申请人的研究领域涉及人工光合作用分解水和还原二氧化碳的电子转移机理，催化剂和半导体材料开发，半导体和催化剂杂化体系等多个不同方向。太阳能燃料转化是一门涉及多个传统化学学科交叉的新兴领域，其中包括光化学，电化学，材料化学和物理化学等多个研究领域。基于现有的化学燃料可能在 50 年之内消耗殆尽和日益严重的温室效应，太阳能燃料生产已受到各国政府和研究机构的高度重视。可持续氢能源的开发和有效的控制二氧化碳的排放，将在不久的将来影响现有的传统能源结构。相关的低廉，新型的催化剂，半导体材料的开发以及相关的电子传递机理的研究是该领域的重要研究方向。申请人的工作基于无机和有机合成，制备新型的半导体材料和催化剂体系，利用光谱理论手段进行机理的研究系统性的涵盖了这个领域的多个主要方向并取得了创新性的进展。

1. 发展新型，高效的过渡金属氧化物半导体材料用于太阳能燃料转化

金属氧化物半导体相比于单晶 III-V, II-VI 族半导体应用于太阳能燃料转化领域有低成本，稳定性高，易制备，能隙和能带位置可调节等优点。大部分过渡金属氧化物因为自身的缺陷更容易形成 n 型半导体，只有很少一部分的研究致力于 p 型氧化物的开发并将这类材料应用在水分解和二氧化碳还原领域。我的研究借鉴了传统高温固体合成方法，合成了一系列的 delafossite 氧化物，将这些氧化物制备成光电极。这种光电极的制作方法可以广泛应用于将其他传统材料制备成光电极材料。其中， CuFeO_2 的光吸收性质和 p, n 型半导体特性可以很好的通过掺杂不同量的镁得到调节。镁掺杂后的 CuFeO_2 电极相比于没有掺杂的 CuFeO_2 电极在可见光区域吸收更强并且这种材料可以在无其它催化剂的情况下催化转化 CO_2 成为甲酸 (JPC 2013)。在此基础上，同系列的多晶质 CuRhO_2 被发现可以成功应用于光催化水分解领域 (JACS 2014)。 CuRhO_2 作为一种新型的光催化水分解材料，导带位置的能量适合于水还原而价带位置的能量适合于水氧化。是少数几个可以直接在光照下分解水的半导体材料。这个材料还被证实可以在氧气存在的条件下进行电极表面的自我修复。在还原条件下，材料中的一价的铜离子可能被还原成金属铜而表面的金属铜可以在氧气存在的条件下再重新被氧化成为一价铜离子。这种氧化物材料是第一个被报道的可以自我修复的光电转化水分解材料。

2. 解决吡啶（盐）作为二氧化碳还原催化剂机理研究的争论

最近的研究发现，二氧化碳还原可以在温和的光化学或者电化学条件下通过芳香杂环胺（比如吡啶及其衍生物）的催化来实现。如此简单的有机催化剂可以通过六个电子传递将二氧化碳直接还原成甲醇。最开始研究者认为这种催化剂可能是通过吡啶的离子基化合物做为单电子载体，通过六次电子传递得到产物。但是，理论计算表明该中间体的形成必须通过施加远高于实验电势的电场能量才能实现，并且中间体氢离子化合物的 PKa 值太高使去离子化形成中间体的难度进一步增加。通过电化学的机理研究，我们证明了中间体不是离子基化合物而是金属氢负离子 (Pt-H) (JACS 2013)。我们的研究很好的解决了理论和实验研究之间产生的争论，并且对于开发简单有机化合物催化还原二氧化碳的电化学机理研究具有指导性的意义。

3. 证明在激发态条件下，钌染色材料的电子转移机理

钌和铱的多光子发色团被广泛应用于染料敏化太阳能电池，含氧感知器和激光限制性材料的开发。发色团在激发态的寿命会极大的影响发色团的氧化还原性质以及转化光能为电能的效率。普通的钌发色团在激发态的寿命为 $1 \mu\text{s}$ 。通过用共轭，低能量的配体修饰发色团的金属中心，发色团的激发态寿命可以延长到 $10\text{--}100 \mu\text{s}$ ，使光电转化的效率得到很大的提高。另外，利用纳秒级激光光解瞬间吸收光谱，光谱电化学分析法和对激发态和基态能量的 DFT 理论计算，我们发现在一个单分子的钌化合物中，虽然配体到配体电荷转移能量是最低的，但是在从激发态回到基态的电荷转移形成单电子氧化物的过程中，电荷的传递主要发生在金属到配体上而不是配体到配体上 (JACS 2010)。这个研究在发色团的电荷传递机理上具有突破性的研究意义。

4. 半导体磷化镓与非贵金属催化剂相结合形成廉价的光阴极材料用于水分解的应用

半导体磷化镓材料与砷化镓 p-n 太阳能电池形成的串接太阳能电池早在 20 年前就被证明可以应用于太阳能燃料分解水制氢气，并且达到了 12% 转化太阳能为氢气的高效率。但是这个电极系统本身在水溶液的条件下非常不稳定，电极表面会

发生自身的还原反应从而使电极材料腐蚀。如何稳定电极表面但同时保持电极对水分解的催化活性是我的研究所要解决的问题。我的研究表明可以通过原子层沉积法将二氧化钛沉积到电极表面提高电极的稳定性并进一步通过廉价的水分解分子催化剂使电极表面保持水分解活性。表面修饰过的半导体电极稳定性可以与贵金属铂修饰过的电极表面稳定性相当。这个研究的创新性在于以往的研究虽然也尝试将二氧化钛做为电极的稳定层但是催化层一般是异相催化剂。分子催化剂具有成本低，制作过程简单，不影响半导体材料吸收等优点，将有望成为一种新兴的稳定光电极材料的方法。这个部分的研究成果已经投稿至 **Nature Material**。

主要论著目录:

(1. 论文作者、题目、期刊名称、年份、卷期、页、总引次数、他引次数、期刊影响因子; 2. 著作: 著者、书名、出版社、年份)

1. **Gu, J.***; Yan, Y.*; Krizan, J. W.; Gibson, Q. D.; Detweiler, Z. M.; Cava, R. J.; Bocarsly, A.B. "p-Type CuRhO₂ as a Self-Healing Photoelectrode for Water Reduction under Visible Light" *J. Am. Chem. Soc.* 2014, 136(3), 830 (citation by others 19, citation by myself 2, impact factor 11.4)

2. Yan, Y.; Zeitler, E. L.; **Gu, J.**; Hu, Y.; Bocarsly, A.B. "Electrochemistry of Aqueous Pyridinium: Exploration of a Key Aspect of Electrocatalytic Reduction of CO₂ to Methanol" *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135(38), 14020 (citation by others 20, citation by myself 3, impact factor 11.4)

3. **Gu, J.**; Chen, J.; Schmehl, R. H. "Using Intramolecular Energy Transfer to Transform non-Photoactive, Visible-Light-Absorbing Chromophores into Sensitizers for Photoredox Reactions" *J. Am. Chem. Soc.*, 2010, 132(21), 7338 (citation by others 21, citation by myself 2, impact factor 11.4)

4. **Gu, J.**; Wuttig, A.; Krizan, J. W.; Hu, Y.; Detweiler, Z. M.; Cava, R. J.; Bocarsly, A. B. "Mg-Doped CuFeO₂ Photocathodes for Photoelectrochemical Reduction of Carbon Dioxide" *J. Phys. Chem. C*. 2013, 117(24), 12415 (citation by others 14, citation by myself 1, impact factor 4.8)

5. **Gu, J.**; Yan, Y.; Helbig, B. J.; Schmehl, R.H. "The influence of ligand localized excited states on the photophysics of second row and third row transition metal terpyridyl complexes: Recent examples and a case study" *Coord. Chem. Rev.* 2015, 282, 100 (citation by others 1, citation by myself 0, impact factor 12.09)

6. Yan, Y.; **Gu, J.**; Bocarsly, A. B. "Hydrogen Bonded Pyridine Dimers: Potential Active Intermediates for Electrocatalytic Conversion of CO₂ to Methanol." *Aerosol Air Qual. Res.* 2014, 14, 515 (citation by others 2, citation by myself 1, impact factor 2.6)

7. Qin, D.; Li, Y.; Wang, T.; Li, Y.; Lu, X.; **Gu, J.**; Zhao, Y.; Song, Y.; Tao, C. "Sn-doped Hematite Film as Photoanode for Efficient Photoelectrochemical Water Oxidation," *J. Mater. Chem. A*. 2015, 13, 6751 (citation by others 0, citation by myself 0, impact factor 6.6)

8. Yan, Y.; **Gu, J.**; Bocarsly, A. B.; "Photo and/or Electrochemical Reduction of CO₂." Carbon Dioxide Utilization: Closing the Carbon Cycle. 2014, ISBN: 9780444627469, Elsevier.

9. Yan, K.; Jarvis, C.; **Gu, J.**; Yan, Y. "Production and catalytic transformation of levulinic acid: A platform for speciality chemicals and fuels" *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2015, 51, 986 (citation by other 0, citation by myself 0, impact factor 5.63)

论文总引用次数: 96 次

论文他引次数: 88 次

查询截至日期: 2015.6.11

查询数据库: ISI Web of Science

主持(参与)科研项目及申请专利：
(项目来源、项目名称、经费、个人在其中的作用)

获科技奖情况:

(项目名称、奖项、获奖时间、本人在其中的作用及排名、获奖总人数)

获各类荣誉奖情况:

The Hans B. Jonassen Memorial Scholarship for research excellent, Tulane University

2010 (1 out of 30)

IBM fellowship awards on computational chemistry, Tulane University

2009(10 out of 100)

受聘后拟开展研究工作的计划和思路（包括研究方向、内容和目标）：

研究方向：

近几十年来，二氧化碳在大气中的含量(396.8 ppm)已经到达了 2000 万年已来的最高值，对地球的大气环境在不久的将来将造成不可逆转的影响。我的研究工作将从国家清洁能源的重大发展战略需求出发，着重于新型半导体材料和还原催化剂的开发及其在二氧化碳还原领域的应用和机理研究。大连物化所太阳能研究部在多年研究积累的基础上已经在光催化水分解（实验和理论）研究上取得了突破性的进展并为我将来的研究提供了很多必要条件。相比于 2 电子还原的水分解体系，6 电子还原的二氧化碳体系在研究方法上有很多近似之处，但是因为多电子的还原，带来了更多的挑战。我希望借助于太阳能研究部已有的研究平台和专家队伍，更好的推动我们国家在清洁新能源领域的发展。

研究内容：

1. 发展高选择性和高效率的半导体和 CO₂ 还原分子催化剂界面的杂化体系

CO₂ 从自身的分子性质来说是非常稳定的，单电子转移还原 CO₂ 的势垒很高，一般需要大于 -1.9 V vs. 标准氢电机的电能量。只有通过多电子和多质子的协调同步转移才能有效的降低 CO₂ 的还原能量。这个过程往往需要有一个高效，稳定的吸光材料和一个高选择活性的催化剂相结合来共同完成。半导体材料本身在以往的研究中已经被证明可以有效的将 CO₂ 转化为甲醇，甲酸和甲烷等产物，但是这个系统的稳定性，选择性都进一步的限制了它的利用。为此，我的研究希望直接或间接的将 CO₂ 还原的分子催化剂用配位化学的方法结合到半导体的表面上。分子催化剂存在在半导体的表面可以进一步的提高半导体本身的稳定性和对 CO₂ 还原的选择性。并且单层或几个分子层的催化剂相比于常用的金属催化剂基本不会影响半导体的光吸收性能。同时，分子催化剂具有配体可调节性，通过对配体的调节，我们可以很好的控制从半导体表面到分子催化剂的电子转移的速率。比如，我们可以通过调节连接基团的链长度来控制电子转移的速率，通过配体上的吸电子基团和给电子基团来调节催化剂本身的氧化还原性质，通过配体的电偶极距来调节半导体表面的平能电势 (flat band) 等。这一方向的研究首先需要合成一系列的简

单的，非贵金属分子催化剂。然后用如赫克反应(heck coupling)等方法将催化剂担载到半导体的表面。之后用表面化学手段研究修饰表面的性质。光电化学研究手段研究整个杂化系统对在光能条件下对 CO₂ 的转化率。气相色谱等研究产物的成分。

2. 将二维催化剂应用到二氧化碳领域

实现 CO₂ 的电化学高效还原，最有效的方法就是降低 CO₂ 的还原势垒。现有的催化剂如金属（铜，银等）和半导体材料在选择性和稳定性上有很大的局限性。而降低该反应的还原势垒可以通过开发新型二维材料（如氧化物，氮化物，碳化物和硫化物），或将已知的二维材料如二硫化钼等应用到 CO₂ 转化领域。虽然在水溶液的环境下，水分解成为氢气的过电势要远远的低于 CO₂ 还原过程所要求的过电势。所以在水的介质中氢离子还原反应是 CO₂ 还原反应的最大竞争反应，并且催化剂二硫化钼是已知的高效，低成本水还原的催化剂。但是一旦将溶液的水介质条件改变成为离子液体介质，或者水和离子液体的混合介质。将极大的改变催化剂对于 CO₂ 还原的选择性。最近的研究表明，边缘暴露的二硫化钼可以在离子液体介质情况下高效的还原 CO₂。为此，本研究将希望采用一系列的金属硫化物，如 TaS₂, NbS₂, NbSe₂, TaS₂, WS₂, WSe₂ 等做为催化剂应用到 CO₂ 还原领域。首先将催化剂担载到玻璃化碳黑电极的表面，研究催化剂的电化学催化性质，之后将催化剂进一步担载到硅半导体或者 III-V 族半导体的表面，进行光电条件下 CO₂ 的还原的研究。还可以进一步通过调节离子介质的化学组成来考察它对于催化剂性能的影响。对于新型二维材料的开发，本人现在与美国的 Rice University 正在进行合作，初步研究成果表明新型的硫化材料的有效中心不是二维材料的边缘而是表面，作为水分解的催化剂这类硫化材料将比相同晶体结构的二硫化钼催化效率更高。

3. 发展多电子转移体系分子催化剂

有机金属催化剂被广泛的应用于水催化和 CO₂ 还原领域。但是由于不能很好的传递多个电子，这类催化剂在水氧化或者 CO₂ 还原领域的应用遭到一定的限制。多金属中心的超分子结构在早先已被应用于解决多电子传递的问题，但是，多金属超分子的桥联接体分子一般都是非共轭的分子结构。因为共轭的配体可能会成为电子陷阱而妨碍电子的进一步传递。但是，如果桥联接体的 π 接受能力和络合于金属

中心的配体的 π 接受能力相当的话，共轭配体也可以被应用于多电子的超分子催化剂体系。应用以上原则，我的研究将使用共轭配体连接多个有机金属催化剂的中心来制备 CO_2 还原的催化剂。共轭配体的低能量可能会将有机金属催化剂的吸收从紫外光领域拓展到可见光领域，同时使催化剂本身从光能到电能的转化效率提高。并且，共轭配体的低能量也可能使催化剂在激发态的寿命增长，从而进一步提高催化剂的催化效率。这部分的研究涉及催化剂的有机合成，表征，电化学和光化学的催化性质研究，以及在激发态情况下应用纳秒级或飞秒激光光解瞬间吸收光谱来研究多电子转移的机理。

4. 半导体和催化剂的杂化体系界面电荷转移的机理研究

半导体材料被广泛应用于太阳能燃料转化水分解和 CO_2 还原领域，无论在光照或者黑暗条件下，半导体界面的电子和溶液中的氧化还原电对因为电势不同，最终因为能带弯曲形成能带耗尽区。我们最近的研究发现，可以通过飞秒光调制反射光谱来研究半导体和催化剂耗尽区的电子分离和电子复合的电荷转移机理。本研究希望将这种方法推广到不同溶液介质下的半导体和催化剂杂化体系电荷转移机理的研究。这个研究会更好的让我们掌握催化剂在太阳能燃料转化系统中的作用，并且为发展高效的光电转化体系提供更好的实验支持。该部分的工作将计划与太阳能研究部的光电材料光谱表征研究组共同合作完成。

工作目标：

- (1) 掌握结构稳定，催化性能高的半导体-催化剂界面合成和组装方法，获得具有长期稳定性，高吸光效率，高光能-产物转化率的 CO_2 还原系统。
- (2) 掌握除金属和已知半导体材料以外的二维材料用于 CO_2 还原的筛选标准
- (3) 在国内外知名学术期刊上发表我们的研究成果，申请自主知识产权专利和成果鉴定
- (4) 培养高质量的博士生和研究生

所需科研条件：

（包括科研经费、实验室面积、仪器设备、人员等，并简要说明所需条件的必要性和预算依据）

申请人的研究内容是关于光电半导体材料和催化剂的开发及其在太阳能燃料转化中的应用，需要实验支持如下：

1) 基础电化学，光化学分析设备：电化学工作站，光化学量子效率测试仪器，紫外光电子光谱仪，纳秒级或飞秒激光光解瞬间吸收光谱，标准 AM1.5 光源

2) 基础材料合成和表征仪器：原子层沉积，X 射线衍射仪，扫描电镜，高分辨透射电镜，气相色谱仪，希莱克管，管式炉及配件等

3) 需要研究生若干人和足够的实验室空间

综上所述，申请人所加入的团队已经具备部分上述仪器或设备，但仍然需要购置一些相关设备，因此需要科研经费约 300 万。

家庭基本情况（主要包括配偶、子女等）：

配偶现在也在美国做博士后，有一子

其它说明及希望研究所协助解决的问题

暂时没有

获得招聘信息渠道（可多选）

- 1、网站招聘信息（请注明网站）
- 2、所外专家推荐申请（请注明推荐专家）
- 3、所内专家推荐申请（请注明推荐专家）
- 4、其他（请注明）以前的同学推荐