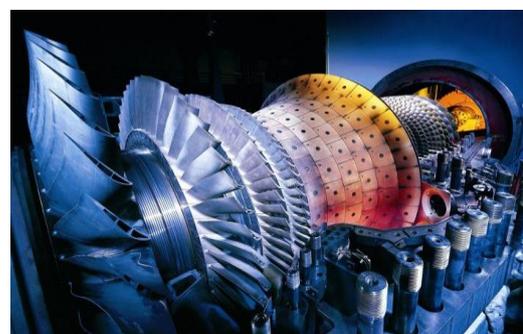


先进能源科技动态监测快报



本期重点

- IRENA：能源转型正在深刻影响全球地缘政治格局
- IEA：铁路部门将在应对能源和气候挑战中发挥关键作用
- 美国家科学院提出聚变研究战略建议
- 欧盟计划资助 8 亿欧元推进能源基础设施建设
- 纳米尺度成像技术首次揭露钙钛矿中碱金属分布和影响

主管：中国科学院文献情报系统战略情报服务协调组

主办：中国科学院武汉文献情报中心



中国科学院武汉文献情报中心
Wuhan Library, Chinese Academy of Sciences
湖北省科学图书馆
Hubei Sciences Library



《先进能源科技动态监测快报》

中国科学院武汉文献情报中心

湖北省武汉市武昌区小洪山西 25 号 (430071)

网址:

<http://www.whlib.ac.cn>

联系人:

郭楷模

guokm@whlib.ac.cn

电话:

027-87199180



先进能源情报网

<http://energy.whlib.ac.cn>



先进能源科技战略情报研究中心

微信公众号



先进能源情报网微信公众号

中国科学院文献情报系统先进能源情报网简介

中国科学院文献情报系统先进能源情报网是在中国科学院文献情报系统学科情报服务协调组的整体组织和指导下,由中国科学院武汉文献情报中心牵头组建,联合中国科学院文献情报系统能源领域相关研究所,共同搭建的情报研究资源共享及协同服务的非营利性情报研究及服务团体。先进能源情报网将汇聚中科院文献情报系统内与领域相关的战略情报研究人员、学科情报人员、研究所科研管理人员、研究所文献情报人员,以及相关的管理和学科专家,通过“协同开展情报研究服务、组合共建情报产品体系、促进情报资源交流共享、提升整体情报保障能力”的工作方式,创新院所协同的情报研究和服务保障模式,促进情报资源的共享、情报需求和情报供给的对接、情报技术方法的合作开发,实现情报能力的扩散和提升,进而对中国科学院各个层面(院层面、所层面、项目团队层面及科研人员层面)的重要情报需求提供坚实保障。

先进能源情报网成员单位

成员单位	单位名称
组长单位	武汉文献情报中心
副组长单位 (排名不分先后)	合肥物质科学研究院 大连化学物理研究所 青岛生物能源与过程研究所 广州能源研究所
成员单位 (排名不分先后)	上海高等研究院 山西煤炭化学研究所 上海应用物理研究所 兰州近代物理研究所 广州地球化学研究所 过程工程研究所 电工研究所 工程热物理研究所 武汉岩土力学研究所 武汉物理与数学研究所 苏州纳米技术与纳米仿生研究所 福建物质结构研究所

目 录

决策参考

IRENA: 能源转型正在深刻影响全球地缘政治格局	2
IEA: 铁路部门将在应对能源和气候挑战中发挥关键作用	5
美国家科学院提出聚变研究战略建议	8

项目计划

欧盟计划资助8亿欧元推进能源基础设施建设	11
DOE支持大学主导的化石能源研发项目	12
DOE资助950万美元探索煤炭材料新用途以开拓新市场	12

前沿与装备

纳米尺度成像技术首次揭露钙钛矿中碱金属分布和影响	13
硫化钼异质结柔性整流器实现无线信号到直流电的高效转化	14
双盐醚类电解质有效抑制富镍正极锂金属电池锂枝晶	15
计算模拟表明硼单原子具备良好的氮催化还原特性	16

本期概要

国际可再生能源机构（IRENA）发布《一个新世界：能源转型重塑地缘政治》报告，首次系统地探讨了由可再生能源驱动的全球能源转型对地缘政治格局的影响：可再生能源（尤其是风能和太阳能）在过去十年中以前所未有的速度增长，正驱动全球能源系统发生根本性、不可逆转的变化，可再生能源逐步发展成为全球能源格局的中心。这种持续向可再生能源的转变不仅仅是从一种燃料向另一种燃料的转变，它涉及世界能源系统的更深层次的变革，将重塑全球权力、国家之间的关系，并引发经济和社会的根本结构变化，从而对全球地缘政治产生深远影响。各国必须为未来的变化做好准备，并制定战略以平稳渡过能源转型期。尽管面临挑战，但能源转型最终将通过应对气候变化、防治污染、促进繁荣和可持续发展，使世界朝着正确的方向发展。

国际能源署（IEA）发布《未来铁路部门：应对能源和气候挑战的新机遇》报告，展望铁路部门到 2050 年发展演变走势，分析其对能源和环境影响：当前，铁路交通承担着全球 8% 的客运和 7% 的货运任务，在交通运输行业拥有重要地位，但其消耗的能源仅占交通运输行业能源使用总量的 2%，仅占全球化石燃料燃烧产生的二氧化碳排放量的约 0.3%，是最有效和排放量最低的运输方式之一。其未来的发展将深刻影响交通运输行业，从而在应对全球能源和气候挑战中发挥关键作用。而铁路的未来将取决于它如何应对日益增长的运输需求和竞争运输模式带来的挑战。展望 2050 年，城市轨道交通和高速铁路将为全世界带来巨大利益。

美国国家科学、工程和医学院（NASEM）发布《美国燃烧等离子体研究战略最终报告》，评估了美国在聚变能研究领域取得的进展，提出了未来的发展建议：自美国参与 ITER 研究以来，燃烧等离子体科学和技术取得了一系列世界领先的成果，并从上述的研究开发项目中获得了实质性的益处。有鉴于此，报告建议一方面美国应该继续参与国际热核聚变实验堆（ITER）计划，从而以最经济方式来获取最先进的燃烧等离子体技术和聚变能电站建造经验；另一方面启动一项聚变能研究国家计划，即建造一座紧凑型聚变能发电中试厂，为到本世纪中叶建立美国首座商用聚变电站奠定基础。

欧盟委员会宣布通过一项全新资助提案，拟向欧洲能源基础设施项目提供近 8 亿欧元的资助，主要聚焦四大主题：电力、智能电网、天然气、CO₂ 输运基础设施项目，旨在推进欧盟关键能源基础设施的建设，促进安全、可靠和高效现代化的欧洲一体化能源网络的构建，推动欧洲清洁能源转型，保障能源和环境可持续发展。详见正文。

加利福尼亚大学圣地亚哥分校的 D. P. Fenning 教授研究团队联合麻省理工学院研究人员利用同步加速器的纳米尺度 X 射线荧光成像技术，首次实现了混合离子钙钛矿碱金属元素分布图的绘制：阐明了碱金属分布情况及其对薄膜及器件性能的影响机理，为优化碱金属掺杂修饰的混合离子钙钛矿电池积累了宝贵的理论知识。

IRENA：能源转型正在深刻影响全球地缘政治格局

1月15日，国际可再生能源机构（IRENA）发布《一个新世界：能源转型重塑地缘政治》报告¹指出，可再生能源快速发展正在驱动全球能源系统发生根本性、不可逆转的转型，化石燃料绝对主导的时代逐步过去，可再生能源正在迈向全球能源格局的中心，进而对全球地缘政治格局产生复杂而深远的影响。正如化石燃料塑造了过去两个世纪的地缘政治版图一样，向可再生能源转型将改变全球权力分配、国家之间的关系以及地缘政治冲突的驱动因素等。报告主要内容如下：

1. 全球能源转型概况

全球可再生能源（尤其是风能和太阳能）在过去十年中以前所未有的速度增长。能源结构持续向可再生能源转型不仅仅是从一种燃料向另一种燃料的转变，它涉及到世界能源系统更深层次的变革，这将产生重大的社会、经济和环境的影响，进而对全球地缘政治格局产生影响，最终重绘21世纪的地缘政治版图。

当前，全球能源转型主要有三个特征：（1）**能源效率提高**：通过改善能源效率能够以较低的能源投入实现经济增长。20世纪，能源需求的平均增长率为3%，大约与全球GDP增长率相同。但近几十年来，能源效率的提高打破了这种关联，即经济发展与能源消费增长脱钩。到2040年，世界一次能源需求年均增幅将下降至1%。

（2）**可再生能源增长**：可再生能源已经成为增长最快的能源。主要的可再生能源包括太阳能、风能、生物能源、地热、水力和海洋能等。（3）**电气化加快**：目前电力占终端能源消费总量的19%，但是随着用能终端电气化水平提高，其份额预计会增加。电力一直是终端能源需求中增长最快的部分，自2000年以来增长速度比能源消费整体增速快三分之二，且这一趋势将持续。自2016年以来，电力部门比传统主导能源投资的石油和天然气上游部门吸引了更多投资，这再次反映了世界经济正在逐步电气化。

2. 可再生能源快速发展的六大驱动力

（1）成本快速下降

随着可再生能源技术进步，其成本不断下降，使得可再生能源得以大规模商业化。成熟的可再生能源技术，包括水电和地热发电，多年来一直具有成本竞争力。而随着技术进步和投资增加，太阳能和风能发电等技术的成本竞争力将日益凸显。

（2）应对污染和气候变化

化石燃料使用造成的包括空气污染和气候变化在内的一系列问题，已经使政府、

¹ A New World: The Geopolitics of the Energy Transformation. https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Publication/2019/Jan/Global_commission_geopolitics_new_world_2019.pdf

企业、投资者和公众认识到未来全球经济必须走低碳/零碳发展道路。气候变化对人类和地球生态系统构成了生存威胁。除非采取紧急措施使能源部门脱碳，否则世界将无法实现《巴黎气候协定》承诺的气候目标，即“将全球平均气温上升保持在比工业化前水平低 2°C，并进一步致力于将气温上升限制在比工业化前水平低于 1.5°C 的水平”。

(3) 设定可再生能源发展目标

受可再生能源大规模商业化和能源部门脱碳需要的驱动，许多国家政府已经提高了其可再生能源发展目标，并采取措施加快可再生能源部署进程。截至当前，全球有 57 个国家已经制定了电力部门完全脱碳的计划，179 个国家制定了国家或州层面的可再生能源目标，27 个政府决定通过补贴和授权支持可再生能源发展。

(4) 持续的技术创新

包括更高的太阳能光伏组件效率和更高更大的风力涡轮机在内的各类技术创新，在加速电力部门可再生能源部署进程方面发挥了重要作用。专利分析结果表明，近年清洁能源技术领域专利申请数量比化石燃料和核能等传统能源领域更多，意味着前者的技术创新更为活跃。而数字和储能技术创新也为能源发展带来了新机遇，如智能电网、物联网、大数据和人工智能等新的数字技术正被应用于能源行业，有助于提高其效率，加快新兴智能发电和配电系统中可再生能源高比例消纳。

(5) 企业及投资者倾向

各国企业纷纷提出行动计划推动能源变革。投资者团队也在向企业施加压力，要求他们减少碳足迹。在 2018 年 12 月波兰气候变化峰会上，持有 32 万亿美元 415 名投资者重申了他们对《巴黎气候协定》的全力支持，并承诺改善与气候相关的财务报告。他们呼吁各国政府采用碳定价，取消化石燃料补贴，逐步淘汰燃煤发电。

(6) 公众意见

公众舆论也是变革的强大力量。在世界各国，消费者越来越偏好购买碳足迹较低的产品和服务，民间社会运动正在向政府和企业施加压力，以减少空气污染和碳排放。宗教领袖则为应对气候变化增加了道德高点。

3. 可再生能源为何能够改变全球地缘政治格局

全球能源转型的最主要驱动力就是可再生能源的兴起，特别是太阳能和风能。可再生能源在许多方面不同于化石燃料，这些差异将产生深刻的地缘政治影响。首先，大多数国家都有可用的可再生能源资源，只是种类略有不同，这迥异于地理位置分布集中且极不均匀的化石能源资源。第二，大多数可再生能源是“资源流动”的形式，而化石燃料则是采用资源库存方式。相比库存，“资源流动”的能源自身不会耗尽，更难被破坏。第三，可再生能源几乎可以以任何规模使用，更适合分布

式的能源生产和消费形式。这增强了可再生能源的民主化效应。第四，可再生能源的边际成本几乎为零，其中一些能源，如太阳能和风能，每增加一倍容量，成本就会降低近 20%。

4. 可再生能源发展正在重塑地缘政治版图

两个世纪以来，地理分布集中的石油、天然气和煤炭资源促使国际地缘政治格局的形成。对石油生产和贸易的控制一直是 20 世纪强权政治的一个重要特征。从化石燃料到可再生能源的转变，可以改变全球的权力关系，这不亚于从木材到煤炭以及从煤炭到石油的历史性转变。毫无疑问，由可再生能源驱动的全球能源转型将产生重大的地缘政治影响，主要包括：

(1) 全球权利分配重新洗牌

历史上因化石燃料出口而享有地缘政治影响力的国家，除非他们能够为新的可再生能源时代调整发展模式，否则他们的全球覆盖力和影响力将会下降。而技术创新的领导国能从全球能源转型中获得最大收益，如美国、中国等，其注重发展利用可再生能源技术，能够增强其自身的全球覆盖面和影响力。转向可再生能源可能会改变政治和经济实力，因为可再生能源倾向于分布式能源系统应用并使其大众化。中央集权国家在能源系统中的角色可能会改变，可能会出现许多新的商业模式并蓬勃发展。与集中式电网系统相比，区域和分布式能源发电方式给家庭和社区更多的自主权。

(2) 国家之间的关系将发生变化

可再生能源不仅影响全球权力分配，它还将重新配置联盟结盟和贸易流动，并围绕电网和新商品建立新的国家依存关系。

联盟结盟转移：如果全球对化石燃料的需求下降，建立在化石燃料基础上的联盟可能会被削弱。联盟可能出于各种其他原因而得以维持，但能源支柱将变得相对不那么重要。

新的贸易版图：可再生能源将改变国家和地区之间贸易关系。广义而言，国家间的关系将从过去以化石能源为重心的全球市场转移到区域电网为重心。今天从世界另一边进口石油的国家将寻求在国内开发可再生能源，并将其电网与邻国电网整合。

(3) 影响各国的能源治国之道

各国长期以来一直将能源作为外交政策的工具，这种做法被称为能源治国。在一个主要由可再生能源驱动的世界里，能源转型的可能后果之一是降低石油和天然气作为外交政策工具的地缘战略重要性。但另一方面，对其他商品的依赖，如电力、生物燃料、氢等新兴燃料或锂、钴、稀土金属等关键材料，可能会造成新的依赖和脆弱性，如切断跨境互联电力或关键原材料供应可能将成为新的地缘政治武器。

5. 对中国的影响评述

报告特别强调，中国将从能源转型中获益，成为全球可再生能源“超级大国”。中国不仅在可再生能源制造业上处于领先地位，在可再生能源技术创新和部署上也居于前列。中国是太阳能电池板、风力涡轮机、电池和电动汽车的最大生产国、出口国和消费国，在可再生能源制造业增加值和专利数量上都领先其他国家。中国目前还是可再生能源的最大投资国，占到全球 45% 以上。上述领先地位使得中国在贸易和经济发展上具有比较优势，提升其能源安全和地缘政治地位。中国发起的“一带一路”、“全球能源互联网”等倡议设定了多个雄心勃勃的战略目标，但同时也引发了一些国家对这些项目债务、透明度、环境可持续性等担忧。与此同时，包括美国、日本、欧洲等也纷纷出台了自身的跨国界基础设施计划，揭示了基础设施互联将成为竞争国家扩大各自影响力和控制权的新战场。

报告最后总结道，由可再生能源驱动的全球能源转型将产生重大的地缘政治影响。它将重塑全球权力、国家之间的关系，并引发经济和社会的根本结构变化。各国必须为未来的变化做好准备，并制定战略以平稳渡过能源转型期。与此同时，能源转型将带来新的挑战。化石燃料出口国如果不为新的能源时代重塑自己，可能会面临不稳定。尽管存在困难，能源转型最终将通过应对气候变化、防治污染、促进繁荣和可持续发展，使世界朝着正确的方向发展。

（于小燕 郭楷模 陈伟）

IEA：铁路部门将在应对能源和气候挑战中发挥关键作用

1 月 30 日，国际能源署（IEA）发布《未来铁路部门：应对能源和气候挑战的新机遇》²报告指出，交通运输行业占到了全球终端能源消费量的近三分之一，占到了全球化石燃料燃烧排放总量的四分之一，因此交通运输行业未来发展走势对全球能源转型意义重大。而铁路交通承担着全球 8% 的客运和 7% 的货运任务，在交通运输行业拥有重要地位，其未来的发展将深刻影响交通运输行业，从而在应对全球能源和气候挑战中发挥关键作用。报告评述了铁路部门发展现状，并展望 2050 年发展演变走势，分析其对能源和环境影响。主要内容如下：

•**铁路是客运和货运重要支柱之一，在交通运输部门拥有重要地位。**当前，传统铁路承担着全球近六分之一的城市周边和城市间的长途客运。高速铁路为内陆短途航班提供了高质量的替代品。在城市，地铁和轻轨提供了可靠、经济和快速的道路交通替代方案，减少了拥堵和二氧化碳排放以及当地污染。货运铁路使得长距离的大容量货物运输得以实现，使得远距离的资源贸易得以实现。

²Railways could provide much greater benefits for energy and the environment, according to IEA report.
<https://www.iea.org/newsroom/news/2019/january/railways-could-provide-much-greater-benefits-for-energy-and-the-environment-acco.html>

•**铁路是最有效和排放量最低的运输方式之一，同时也是消耗能源形式最多样化的交通形式。**铁路部门承担着全球 8% 的客运和 7% 的货运，但仅占交通运输行业能源使用总量的 2%。铁路部门每天消耗的石油不到 60 万桶（约占全球石油消费量的 0.6%），每天消耗电力约 290 TWh（在全球电力消耗量的份额超过 1%）；就排放而言，铁路占到了全球化石燃料燃烧产生的二氧化碳排放量和细颗粒物排放（PM_{2.5}）的约 0.3%。如果将现有铁路运输服务全部换成汽车和卡车，全球运输相关石油消耗将会增加 800 万桶/日，运输相关温室气体排放则将大幅增加 12 亿吨。

•**如今，大多数铁路网络位于印度、中国、日本、欧洲、北美和俄罗斯，而地铁和轻轨网络则分布在世界上众多的大城市。**全球约 90% 的传统铁路客运发生在上述国家和地区，印度以 39% 占比位列全球第一，其次是中国（27%）、日本和欧盟则以 11% 和 9% 分列三、四位。在全球范围内，约四分之三的传统客运铁路活动使用电力，其余四分之一采用柴油。近年来，大量的资金投向了高速铁路和地铁，尤其是在中国，在短短十年内这两种类型交通网络里程都超过了世界其他国家，成为全球第一。如今，中国占全球高速铁路总里程的三分之二，超过了日本（17%）和欧盟（12%）。相比之下，城市轨道交通分布更加均匀：中国、欧盟和日本各大约五分之一的城市轨道交通活动。高速铁路和城市轨道交通都完全由电力驱动。铁路货运集中在中国和美国，两国各占全球铁路货运活动的四分之一，俄罗斯占五分之一。

•**铁路部门的未来将取决于它如何应对日益增长的运输需求和竞争运输模式带来的挑战。**发展中经济体和新兴经济体的收入和人口的增加使得交通运输需求大幅增长，但出于速度和灵活性的考量使得人们倾向于选择汽车和航空交通。收入的增加也推动了货运需求的增长，因为收入的增加加上数字技术，使得人们对快递效率提出了更高的要求。铁路部门在商业方面具有重要竞争优势，但这需要对铁路基础设施进行额外的战略投资，进一步努力提高其商业竞争力和技术创新。

•**在基础情景中，根据目前处于不同建设和规划阶段的项目来预测，到 2050 年铁路基础设施的年度投资额将增加到 3150 亿美元。**在上述情景中，假设未来政策制定中没有重新对铁路进行规划，则城市轨道交通基础设施建设步伐将最快。未来五年内在建或将要建设的地铁线路总里程将是 1970-2015 年任何五年期间建成的地铁线路总里程的两倍长。在此期间，城市轨道交通的客流量将空前增长，预计到 2050 年客流量将比目前的水平高 2.7 倍。印度和东南亚的增长最为强劲，城市轨道交通增长超过 7 倍。在当前城市轨道交通客流量最多的三个国家中，到 2050 年中国将增长三倍，日本增长 25%，欧盟增长 45%。

•**基础情景中，高速铁路也将强劲发展，特别是在未来十年。**与过去十年一样，中国依旧将主导全球高铁发展；从现在到 2050 年，全球近一半新建高铁项目都将发生在中国；这将导致中国的客运量增长三倍多，同期日本的客运量将增长 85%，欧

盟增长 66%。然而，到 2050 年铁路在世界交通客流量所拥有的市场份额将会比现有的水平低（当前份额与汽车和航空相当）。到 2050 年，所有类型的交通运输货运量将是 2017 年的三倍。

•**基础情景中铁路活动的强劲增长将刺激铁路能源需求增长，预计到 2050 年，铁路用电量将达到近 700 TWh。**到 2050 年，97% 的铁路客运和三分之二的铁路货运都发生在电气化铁路上，意味着铁路离全面电气化还有一定距离。尽管如此，与其他交通运输方式相比，铁路能源消费量微乎其微。假设到 2050 年，将所有铁路服务替换为汽车和卡车，全球石油需求将比基础情景高出 950 万桶/日，运输行业二氧化碳排放量将高出 18 亿吨，PM_{2.5} 排放量则将增加 34 万吨。

•**高铁情景基于三大假设来探讨铁路给能源和环境带来的益处。**高铁情景的三大假设是：通过确保铁路网络利用率最大化，消除技术障碍以及将铁路服务无缝整合到当前交通运输组合中，最大限度地降低单位乘客（或者单位货运，即每吨）每公里成本。最大化铁路系统的收入，例如通过“土地价值获取”，即利用火车站的“聚合”能力，使其附近的商业和住宅物业价值由于交通运输环境改善而增加，并利用这一增值为铁路系统提供资金。实施的政策要确保所有形式的运输都能够为其提供的服务获得足够的收入；传统上，这是通过燃油税实现的，但道路收费，特别是拥堵收费，可能仍然会有效。

•**在高铁情景中，到 2050 年全球铁路客运活动将比基础情景高出 60%，铁路货运活动将高出 14%。**城市轨道交通增长潜力最大：预计到 2050 年地铁和轻轨活动将是基础情景的 2.6 倍，主要集中在中国、印度和东南亚人口密集的城市。高铁情景分析了高速铁路的潜力，为短距离航空客运提供可靠、便捷和具有价格竞争力的替代方案。高铁情景中，高铁运输活动将比基础情景高 85%。

•**积极、战略性部署铁路有望让全球交通运输行业的二氧化碳排放量在 21 世纪 30 年代末达到峰值。**到 2050 年，高铁情景中交通运输行业的石油用量比基本情景少 1000 万桶/日，少排 6 亿吨二氧化碳，PM_{2.5} 排放量减少了约 22 万吨。在高铁情景中，由于城市轨道交通和高速铁路运营大幅增加，到 2050 年该情景中铁路用电量预计比基础情景高 360 TWh，这一增长大致相当于泰国和越南目前的用电量之和。

•**高铁情景中列车本身和铁路基础设施的年平均投资额预计为 7700 亿美元，较基础情景增加 60%。**增加投资的最大部分用于城市轨道交通（近 1900 亿美元）和高速铁路（700 亿美元）的基础设施建设。由于这些投资，到 2050 年交通运输行业的燃料支出将比基础情景减少约 4500 亿美元。到本世纪中叶，印度可以节省高达 640 亿美元的交通运输燃料支出。

•**城市轨道交通和高速铁路将为全世界带来巨大利益。**在城市化快速发展的时代，城市轨道交通系统可以为公路旅行提供可靠、经济、有吸引力和快速的替代方案：地

铁和轻轨可以减少拥堵，提高交通最繁忙的道路吞吐量，减少当地污染物和温室气体排放。通过协调规划，城市轨道交通系统增加了高密度区域的吸引力，提高了大都市的整体经济产出和活力。高速铁路可以作为短途航班高质量的替代品。随着收入的增加，对客运航空的需求将继续快速增长，而这种交通运输方式去碳化极其困难、而且成本高昂。如果舒适性和可靠性是关键性能标准，那么经济性更好、排放更低的高速铁路完全可以成为航空的替代品。

(于小燕 郭楷模)

美国国家科学院提出聚变研究战略建议

美国国家科学院于 2018 年底发布《美国燃烧等离子体研究战略计划最终报告》³，评估了美国在聚变能研究领域取得的进展，指出美国已经在该研究领域取得了一系列世界领先的成果，并从上述的研究开发项目中获得了实质性的益处，而为了保持这种世界领先优势，美国还必须进一步扩大和推进国内核聚变能源的研发工作。有鉴于此，报告建议一方面美国应该继续参与国际热核聚变实验堆（ITER）计划，从而以最经济方式来获取最先进的燃烧等离子体技术和聚变能电站建造经验；另一方面启动一项聚变能研究国家计划，即建造一座紧凑型聚变能发电中试厂，为到本世纪中叶建立美国首座商用聚变电站奠定基础。报告主要内容如下：

1、燃烧等离子体科技研究进展

•自美国参与 ITER 研究以来，燃烧等离子体科学和技术取得了一系列世界领先的成果。发现了控制和维持燃烧等离子体的新思路，美国开发的理论和计算模型显著提高了控制等离子体稳定性、预测等离子体约束和增强聚变能性能的能力，成功测试了控制和缓解瞬态事故的方法，对燃烧等离子体科学认识进一步深入。相关成果主要包括以下研究领域：等离子体约束预测、等离子体稳定性及运行边界、高能粒子物理、避免及缓解瞬态和异常事件、聚变技术和工程科学等，大大提高了对 ITER 燃烧等离子体实验将成功实现其科学使命的信心。

•在超越 ITER 向实现聚变能发电方面也取得了一定的进展，虽然远未达到燃烧等离子体实验要求的科技水平，但有助于实现低成本聚变能发电。超导高场磁体新技术可以缩小下一步聚变示范试验设施的尺寸，理解和预测模型的进步也有助于进行更紧凑的后续实验。研究成果主要包括以下领域：等离子体废气物理学、驱动等离子体电流、集成燃烧等离子体配置、三维磁场和仿星器、理论和百万兆模拟、使能技术、高级算法、高温超导体、先进材料与制造、聚变包层研究及氦燃料循环、聚变安全、聚变能集成系统工程等。还需进一步进行燃烧等离子体科学、聚变核技术和聚变材料科学方面的研究，以降低成本，最终实现聚变能发电。

³ Final Report of the Committee on a Strategic Plan for U.S. Burning Plasma Research.
<https://www.nap.edu/catalog/25331/final-report-of-the-committee-on-a-strategic-plan-for-us-burning-plasma-research>

•**向聚变能发电的下一步发展时机已经到来。**聚变能新技术及预测模型的进步，ITER 科学和运行的进展，以及在美国和其他国际合作伙伴进行的工程系统研究表明，已经做好了继续进行研究，向实现经济高效的商业聚变能发电迈出下一步的准备。

•**燃烧等离子体的实现对于完全理解强耦合系统以及推进聚变能技术的应用至关重要。**聚变等离子体理论和计算的进展，结合美国应用先进诊断技术的实验，增加了对燃烧等离子体性能预测的信心，并明确了有前景的聚变能源的要求。

•**ITER 的研究和运行带来的科学和技术效益对于美国的聚变能发展极为关键。**ITER 项目集成了多种先进技术，结合了多个国家的科学和工程专业知识、工业能力和资金资源，是聚变能发展的关键。ITER 将对控制等离子体稳定性、等离子体与第一壁材料的相互作用、等离子体约束和聚变功率输出的方法进行测试，将探索和验证聚变反应产生高能粒子的理论预测和维持燃烧等离子体的方法。ITER 在美国燃烧等离子体研究活动中发挥着核心作用，目前是**唯一在发电厂规模产生燃烧等离子体的项目**，其实践经验对于美国的商业聚变能发展极为重要。

针对上述美国参与 ITER 项目所获得的成果以及 ITER 项目的重要性，报告提出了美国未来聚变能研究发展建议，包括：

(1) 美国政府应履行其建造和运行 ITER 的承诺，作为其聚变能长期战略计划中燃烧等离子体部分的主要试验。短期内，美国能源部（DOE）应重点关注最大限度从 ITER 伙伴关系中受益；长期内，应鼓励在 ITER 上开发和测试燃烧等离子体试验，将有助于紧凑型聚变发电中试厂的可靠运行。

(2) 紧凑型聚变发电中试厂需要将燃烧等离子体研究扩展到 ITER 之外。环形磁约束、等离子体控制以及全等离子体优化的集成解决方案的进展，明确了需超出 ITER 实验范围进行改进，并展示了如何使用精心设计和模拟来降低成本并加速聚变能发展。

(3) 如果美国退出 ITER 项目，其聚变研究工作将受到严重干扰。美国的研究将与国际脱节，无法分享燃烧等离子体关键研究成果并共同分担聚变研究示范成本。美国需要设计、许可和构建替代方法，以获得创造和控制产生能源的燃烧等离子体的经验。聚变研究设施成本将增加，美国实现聚变发电目标将会延迟。如果美国决定退出 ITER 项目，DOE 应启动一项计划继续进行研究，需建造一个紧凑型核聚变发电中试厂。

2、建造紧凑型聚变发电中试厂，推动磁约束核聚变走向经济能源

尽管还需进行大量研究，但建造紧凑型聚变能发电设施已有技术基础。主要体现在：①虽然还需进行磁体工程研究，以证明紧凑型聚变能发电设施的可行性，但新型高场超导磁体技术与先进的燃烧等离子体科学的结合将减小磁约束聚变发电系统尺寸和降低成本；②虽然从偏滤器移除热量并减少由等离子体溅射引起的材料

侵蚀仍是重点研究领域，但在较高场和较低总功率下的紧凑型聚变装置将是有效的解决方案；③虽然需要对重大进展进行验证，以实现高性能约束聚变装置的连续运行，但紧凑型聚变装置的较高磁场使其在高聚变功率密度、高极向 β 和高自举电流下的运行比其他实现商业聚变发电的途径更为容易；④虽然需要进一步的研发来建立大型高场高温超导磁体的技术基础，但是制造高温超导磁体的工业水平不断提高，与行业和其他 DOE 业务局合作的机会不断增加，并且高温超导磁体快速发展，将大大减少磁约束聚变装置的尺寸，并支持紧凑型聚变发电技术的发展；⑤需跨越开发合金和复合材料的早期阶段，包括辐射效应、化学相容性和腐蚀、等离子体材料相互作用和氦渗透对材料的未知影响，以及复杂中子、等离子体材料和热-机械负荷条件下的组件性能和退化。研究应从相对简单的单变量实验到非常复杂、完全集成的多变量测试；⑥加热、诊断和控制等技术的持续进步确保这些技术可以用于更高功率的长脉冲聚变设施；⑦聚变能相关技术概念已经做好设计和测试准备，这些概念和分离、加工氦的创新方法，对于开发紧凑、低成本的聚变反应堆至关重要。针对紧凑型中试电厂建设，报告提出了下述一系列建议，包括：

(1) 美国应启动一项新的国家研究计划，以尽可能低的成本建造紧凑型核聚变中试电厂，从而加速聚变能发展。 目前已经在预测和产生聚变反应堆所需的高压等离子体方面取得了重大进展，将其与开发聚变相关技术（如高温超导磁体和先进材料）相结合，将使建造紧凑型聚变发电设施在技术上成为可能，而且其成本足以吸引工业界的参与。

(2) 在近期和中期，DOE 应该解决建造紧凑型聚变中试电厂的关键研究需要。 主要包括：①通过参与 ITER，了解发电厂规模的燃烧等离子体的基础科学、生产和控制；②对具有高约束特性和兼容等离子体排气系统的磁约束等离子体所需的科学和工程进行示范；③推进高临界温度超导体发展，并对使用大型聚变线圈实现高磁场进行示范；④扩展美国在核聚变技术、先进材料、安全以及氦和包层等技术的研究计划；⑤进行等离子体科学的研究创新，例如仿星器优化配置和低成本聚变辐照设施的创新方法，以及降低成本和改进聚变发电的聚变工程科学。

(3) 除研究燃烧等离子体外，还需建造新的研究设施以发展建造紧凑型中试电厂所需的关键技术和科学。

(4) 中试电厂计划应分两阶段进行。 第一阶段，示范分钟级聚变发电，确定紧凑型聚变能发电的可行性，包括评估等离子体材料相互作用以及氦的安全、泵送、回收、增殖和提取；第二阶段，连续多日运行中试电厂，进行与商业发电同等的聚变材料和部件测试，包括全燃料循环的包层测试。

此外，报告还总结了国家燃烧等离子体科学与技术计划的实施要素、大致研究时间表及对国家预算的影响。“继续参与 ITER”和“建造紧凑型聚变中试电厂”就

要求美国未来 20 年每年向核聚变研究投入约 2 亿美元经费。这两项研究工作共同确立了聚变能的科学和技术可行性，并将聚变发电计划从目前的可行性阶段推进到经济有效的路径阶段，直至实现聚变能发电。报告还认为，实施该战略计划需 DOE 聚变能科学办公室扩大组织结构，进行更深思熟虑的规划，鼓励私营部门和聚变能研究团体的参与，协调燃烧等离子体科学、材料科学、核聚变科学和技术、低成本聚变发电所需工程科学的研究工作。

(岳芳 郭楷模)

项目计划

欧盟计划资助 8 亿欧元推进能源基础设施建设

1 月 23 日，欧盟委员会宣布通过一项全新资助提案，拟向欧洲能源基础设施项目提供近 8 亿欧元的资助⁴，旨在推进欧盟关键能源基础设施的建设，促进安全、可靠和高效现代化的欧洲一体化能源网络的构建，推动欧洲清洁能源转型。该提案资助经费将由欧盟基础设施基金计划“互联欧洲设施（CEF）”提供，其中 4.12 亿欧元用于电力项目，9200 万欧元用于智能电网项目，2.86 亿欧元分配给天然气部门，930 万欧元用于支持 CO₂ 输运基础设施建设。

表 1 欧洲能源基础设施建设具体内容

主题	具体内容	资助金额/欧元
电力	<ul style="list-style-type: none"> •欧洲北海海上互联电网走廊：在北海建立大型的海上电网，把北海周边国家的电网系统与北海的大型风电场连接起来，把多余的可再生能源电力输送到英国以及其他欧洲国家，从而保障上述国家能源的安全供应 •欧洲北海连接中东欧的互联电网：一是开展连接奥地利和意大利之间互联电网建设的可行性研究；二是开建一条连接保加利亚和马其顿的 400 千伏电网 •波罗的海能源互联走廊：一是开展波罗的海电力同步项目，消除波罗的海国家电力基础设施和欧盟的差距，使其能够与欧盟一体化电力网络同步，全面融入欧盟电力市场，提高该地区电力系统的供电稳定性；二是研发连接瑞典和芬兰之间的第三代交流电网技术 	4.12 亿
智能电网	<ul style="list-style-type: none"> •开发创新的电网系统集成技术，在克罗地亚和斯洛文尼亚发展智能电网，以提高上述两个国家电网同步运行稳定性和安全性 •在捷克和斯洛伐克边境建立智能电网，用于改善两国之间的电网现代化 	9200 万

⁴ Energy Union: EU invests a further €800 million in priority energy infrastructure. http://europa.eu/rapid/press-release_IP-19-561_en.htm

天然气	<ul style="list-style-type: none"> •连接中东欧的北海天然气管线项目：开展保加利亚天然气网络现代化改造升级，实现多元化天然气供应，增强能源安全 •改造升级拉脱维亚 Incukalns 天然气储气库，增加储气容量 •开展连接丹麦和波兰之间的天然气管线建设 	2.86 亿
CO ₂ 输运基础设施项目	鹿特丹港 CO ₂ 输运基础设施建设工程和碳捕集、利用与封存（CCUS）项目，目标是在西北欧建立一个核心位于鹿特丹港的开放跨境 CO ₂ 输运网络和碳封存基地	930 万

（程向阳 郭楷模）

DOE 支持大学主导的化石能源研发项目

1 月 7 日，美国能源部（DOE）宣布在“大学培训和研究”倡议框架下投入 480 万美元，支持由大学主导的化石能源应用方面新遴选的研发项目⁵，旨在培养化石能源领域的下一代科学和工程专业人才，推进化石能源技术的进步，保障美国化石能源可持续发展。本次资助的项目着重聚焦四大主题领域，具体内容参见表 1。

表 1 “大学培训和研究”计划化石能源研究新项目具体内容

承担机构	研究内容
新兴粉煤灰微量重金属的检测技术	开展燃煤过程中粉煤灰废弃物中痕量重金属（砷、硒、铅等）的形态转化和迁移释放机理研究，在此基础上开发出更高效、更高精度的砷、硒、铅等重金属浓度的测量技术
化石发电厂网络安全传感器	探索新兴数字技术（如区块链、分布式 P2P 互联网协议等）在化石发电厂中的应用，从而保护和安全管理化石燃料发电厂的传感器收集的数据和信息流，优化化石燃料发电厂运营
计算机仿真建模	利用先进的高性能计算机开展化石燃料电厂的高精度仿真建模研究，仿真系统能够模拟电厂实时运行中各种异常现象和故障情况，并进行精准定位分析并提供解决方案，从而指导电厂运营人员的操作，保障电厂安全稳定高效运行
发电厂废水回收利用	依托新材料、新工艺一方面减少化石燃料电厂的水分消耗量，一方面对电厂排放的废水进行相关的处理（如废水脱硫处理），实现部分废水回收再利用，减少污水排放

（郭楷模）

DOE 资助 950 万美元探索煤炭材料新用途以开拓新市场

1 月 15 日，美国能源部（DOE）宣布投入 950 万美元开展煤炭材料新用途的探索研发项目⁶，旨在针对美国本土的煤炭原材料开发全新的利用技术和途径，包括改善煤炭原料品质、将煤炭用于生产钢铁和高价值产品等，为煤炭创造新的市场机会，

⁵ Energy Department Announces Nearly \$5 Million in Fossil Energy Research Funding for Universities. <https://www.energy.gov/fe/articles/energy-department-announces-nearly-5-million-fossil-energy-research-funding-universities>

⁶ DOE to Invest Up to \$9.5 Million to Create New Market Opportunities for Coal. <https://www.energy.gov/fe/articles/doe-invest-95-million-create-new-market-opportunities-coal>

实现煤炭价值链利益的最大化。本次资助项目主要关注三大主题领域，具体内容参见表 1。

表 1 煤炭材料新用途探索项目具体内容

主题领域	主要内容
改善用于美国电力生产和炼钢的煤炭原料品质	<ul style="list-style-type: none"> •发展用于发电或炼钢的煤炭原料改良技术，并进行实验室和小型中试生产（产量小于 3 吨/天） •改进选煤工艺，丰富原料和产品，提高产品质量
煤基高价值产品生产技术	<ul style="list-style-type: none"> •开展以煤炭为原材料生产高价值产品技术研发，并进行实验室规模批量或半批量试生产技术测试 •煤基高价值产品的连续批量生产过程测试，即开展实验室规模或小型中试生产测试
煤炭转化为高性能碳材料的新技术	通过微波或低温等离子体等替代技术，将煤和/或相关副产物转化为高性能的碳材料，如碳纤维、碳纳米材料、结构材料和复合材料，以及用于增材制造的材料

（岳芳 郭楷模）

前沿与装备

纳米尺度成像技术首次揭露钙钛矿中碱金属分布和影响

当前经认证的转换效率最高的钙钛矿太阳电池（PSCs），其光敏层是由混合阳离子和混合阴离子制备形成的。其中碱金属阳离子（Rb、Cs、K 等）被广泛用于阳离子位替代掺杂，因为其能够有效改善电池性能（改善热稳定性或者改善电池效率）。然而，目前对引入碱金属为何能够改善电池性能潜在机理却不甚明了。加利福尼亚大学圣地亚哥分校的 D. P. Fenning 教授研究团队联合麻省理工学院研究人员，首次利用纳米尺度分辨率的成像技术揭露了钙钛矿中碱金属的分布及其对钙钛矿薄膜和器件性能的影响机理。研究人员首先配置了甲脒/甲胺混合阳离子和溴化铅/碘化铅混合阴离子前驱体溶液，随后利用旋涂法制备了混合阳离子、混合阴离子组成的钙钛矿薄膜 $(\text{MAPbBr}_3)_{0.17}(\text{FAPbI}_3)_{0.83}$ 作为参照样品（命名为 I/Br），此外在上述基础上制备了碱金属卤化物（包括碘化铷[RbI]、碘化铯[CsI]）掺杂的新样品（单独掺杂或者同时掺杂，分别命名为 Rb-I/Br、Cs-I/Br 和 Rb/Cs-I/Br）。随后将这些钙钛矿用于组装完整的电池结构，并进行电化学性能测试。结果显示，基于无碱金属掺杂的钙钛矿薄膜电池其转换效率最优值为 12.6%，而有碱金属掺杂的钙钛矿太阳电池效率则显著改善，其中 RbI 和 CsI 同时掺杂的样品转换效率最高达到了 19%。通过掠入射 X 射线谱对钙钛矿薄膜进行表征发现，无碱金属掺杂的钙钛矿薄膜中存在显著的 PbI_2 特征峰（ PbI_2 存在会促进载流子复合导致电池性能下滑）；而含有碱金属的薄膜 Rb-I/Br、Cs-I/Br 和 Rb/Cs-I/Br 中则没有探测到 PbI_2 ；意味着碱金属引入可以有效抑制 PbI_2 相的形成。为了进一步探明碱金属的潜在作用机理，研究人员利用基于同

步加速器的纳米尺度 X 射线荧光成像 (n-XRF) 技术绘制了钙钛矿的元素分布图, 实验结果发现在一定掺入量下 (不超过 1%, 该比例为前驱体中碱金属和 PbI_2 的摩尔比), 随着 RbI 、 CsI 或者 RbI/CsI 混合物的引入, 钙钛矿薄膜中卤素分布变得更加均匀。瞬态吸收谱测试显示, 相比没有引入碱金属钙钛矿薄膜, 含有碱金属的钙钛矿薄膜的载流子迁移能力和寿命都得到改善, 而这主要是卤素更加匀质化的结果。然而, 当掺杂的碱金属量超过 1% 后, 就会容易形成碱金属富集区, 成为了载流子的复合中心, 造成电池性能下降。该项研究通过同步加速器的纳米尺度 X 射线荧光成像技术首次实现了混合离子钙钛矿碱金属元素分布图的绘制, 阐明了碱金属分布情况及其对薄膜及器件性能的影响机理, 为优化碱金属掺杂修饰的混合离子钙钛矿电池积累了宝贵的理论知识。相关研究成果发表在《*Science*》⁷。

(郭楷模)

硫化钼异质结柔性整流器实现无线信号到直流电的高效转化

无线充电技术可通过电磁感应、电磁耦合谐振和无线电波等方式实现非物理接触式的电力传输, 从而实现为各种用电设备 (如手机、平板电脑、电动汽车等) 进行无线充电, 将极大地改善人们的生活方式, 极具发展前景。由麻省理工学院 Tom  Palacios 教授研究团队牵头的国际联合研究团队研发出一种基于硫化钼 (MoS_2) 异质结的整流器, 能够有效地捕获生活中无处不在的无线通信 (Wi-Fi) 信号发射出去的交流电磁波, 并将其高效转化到直流电, 为便携式电子设备提供了全新的无线充电解决方案, 实现上网充电同步进行。研究人员首先基于二维的金属相和半导体相的 MoS_2 薄膜制备了柔性的肖特基二极管 (整流器, 把交流电转换成直流电的装置), 电流响应测试结果显示其电流功率比达到了 4.7 A/W , 与性能最好的刚性晶体硅二极管相当, 表明其具备了优秀的整流性能。而高频性能表征发现该柔性 MoS_2 异质结整流器具备了极宽电磁波频率响应范围, 涵盖了目前生活中大部分的无线电磁波信号, 如全球的卫星、蓝牙、无线、4G 通信甚至下一代 5G 通信电磁波信号频段, 截止频率达到了 10 GHz , 比当前商用的最佳柔性整流器高出一个数量级。随后将上述柔性 MoS_2 异质结整流器与柔性电磁波接收器组合, 在接收 2.4 GHz 、 8dBm 的 Wi-Fi 信号输入后, 柔性 MoS_2 异质结整流器的输出效率可达 40%, 与当前性能最佳的硅或砷化镓整流器的输出功率相当。这意味在接收大约 156 微瓦的 Wi-Fi 信号, 该设备可产生功率约 62.6 微瓦的电能, 足以点亮低功耗的移动显示器或硅芯片。此外相比传统的刚性整流器不同, 新异质结整流器是柔性的, 能够作为电源应用于各类具备曲线外观的电子设备, 具有更加广阔的应用空间。该项研究研发了具备高达 10 GHz 截止频率的宽频无线电波响应范围的柔性整流器, 能够将无线信号的电磁波

⁷ Juan-Pablo Correa-Baena, Yanqi Luo, Thomas M Brenner, et al. Homogenized halides and alkali cation segregation in alloyed organic-inorganic perovskites. *Science*, 2019, DOI: 10.1126/science.aah5065

高效地转化为直流电，为无线充电技术开辟了全新技术路径，有望实现移动电子设备充电和上网两不误。相关研究工作发表在《Nature》⁸。

(郭楷模)

双盐醚类电解质有效抑制富镍正极锂金属电池锂枝晶

锂金属电池的理论容量高达 3860 mAh/g，近十倍于传统的石墨负极锂电池，被视为是一种极具应用前景的高能量密度电池。然而锂金属电池充放电过程中会产生大量枝晶引起电池短路，导致性能快速衰退循环寿命大幅下降，因此亟需研究消除锂枝晶生长的方法。美国陆军研究实验室 Kang Xu 教授研究团队联合加利福尼亚大学圣地亚哥分校研究人员首次报道了一种全新的双盐醚类电解液，有效解决了基于富镍的镍锰钴（NMC）正极锂金属电池锂（Li）枝晶生长问题，并且通过实验和理论模拟研究相结合方法系统阐明了 Li 金属在上述双盐电解液中沉积/溶解的电化学反应机理。一系列研究表明相比酯类电解质，金属 Li 在醚类的电解质反应活性更低，有助于抑制 Li 金属枝晶生长，为此研究人员制备了基于二甲醚（DME）溶剂的双盐电解质（BSEE），双盐分别为双（氟磺酰）亚胺锂（LiFSI）和双（三氟甲烷磺酰）亚胺锂（LiTFSI）。为了对比，研究人员也同时制备了溶有 LiFSI 单盐 DME 电解质（SSEE）、以及传统的碳酸酯类电解质。通过各种单盐和双盐醚电解质的阻抗谱和核磁数据的研究，并结合分子动力学模拟发现，一方面相比 SSEE 电解质，BSEE 电解质离子导电率更高；此外，每个 Li⁺能与来自 TFSI 离子中的 1.14 个氧结合，而对比之下，仅仅能和 0.93 个来自 FSI 中的氧结合，表明 Li⁺离子更倾向与 TFSI 离子结合而不是 FSI 离子，即存在 Li-TFSI 配位的偏好性，这种偏好会直接反应到电池循环电化学反应中。Li-Cu 半电池恒电流循环测试显示，基于 BSEE 电解质的电池工作窗口电压上限可达到 4.4V（意味着电池有更宽的工作范围），这是目前已经报道的醚类电解质锂金属电池电压窗口上限的最高值。基于传统碳酸酯电解质电池库伦效率为 80%，然而循环 85 次后性能就开始大幅下滑；而基于 BSEE 和 SSEE 电池在经过 200 多次循环后均可以保持近 98% 库伦效率，表现出更加优异的循环稳定性；对循环后的半电池的 Li 负极进行扫描电镜表征，发现基于碳酸酯类电解质的电池 Li 负极循环后表面形成了凹凸不平的网络状的 Li 枝晶；相反基于醚类电解质 Li 负极依旧保留着与初始状态差不多的光滑表面，只是 BSEE 更为光滑，意味着 Li⁺在上述电解质环境中实现了均匀成核和沉积。接着将电解质用于高镍含量的镍锰钴正极的锂金属电池，采用 BSEE 的电池在 300 次循环后仍可保持初始容量的 88% 以上，比 SSEE 增提高了近 10%，比碳酸盐类更是提高了近 25%。DFT 密度泛函理论模拟研究显示，在双盐电解质系统中，与 TFSI 与 FSI 离子结合形成的固体电解质中间相

⁸ Xu Zhang, Jesús Grajal, Jose Luis Vazquez-Roy, et al. Two-dimensional MoS₂-enabled flexible rectenna for Wi-Fi-band wireless energy harvesting. *Nature*, 2019, DOI: 10.1038/s41586-019-0892-1

(SEI) 更为稳定 (尤其是前者), 从而能够充当保护膜有效地屏蔽 DME 与 Li 负极表面的直接接触, 有效地抑制 Li 枝晶的生成, 从而增强电池性能。该项研究设计制备了双盐醚类电解质, 应用于高镍含量的镍锰钴正极锂金属电池, 有效抑制锂枝晶生长, 增强电池性能和循环稳定性; 并通过理论模拟阐明了该双盐醚类电解质对锂金属沉积/溶解行为作用机理, 为设计开发安全高效锂金属电池提供了全新的思路。并且相关工作发表在《*Energy & Environmental Science*》⁹。

(周斌 郭楷模)

计算模拟表明硼单原子具备良好的氮催化还原特性

作为氮气的还原产物, 氨 (NH_3) 不仅是一种重要的化学品, 而且也是很有前景的储能中间体。然而, 目前规模化制 NH_3 主要采用“哈伯法”, 反应需要在高温高压下才能进行, 条件苛刻, 且能耗高。因此, 开发低能耗、温和条件下就能够催化活化氮气还原成 NH_3 的催化剂成为研究热点。澳大利亚莫纳什大学 Chenghua Sun 教授研究团队通过密度泛函理论, 设计了吸附的、取代的和晶格间隙插入的三种状态共计 21 种硼单原子催化剂, 理论研究表明, 负载于石墨烯基底的硼单原子催化剂和被硼单原子部分取代的 h-MoS₂ 具有很强的氮催化还原 (NRR) 能力, 同时能够抑制竞争性的氢析出反应, 因此是最具应用前景的 NRR 催化剂候选者。研究人员通过理论模型在石墨烯 (G)、氮化硼 (BN)、硫化硼 (BS)、黑磷 (BP)、S-三氮杂苯氮化碳 (S)、三均三嗪氮化碳 (T)、H 相硫化钼 (H) 和 T 相硫化钼 (T) 等八种常用二维材料上加入硼原子模拟构建出 21 种三大形态 (吸附的、取代的和晶格间隙插入的) 的硼单原子催化剂。研究发现, 完全配位的硼单原子没有 NRR 活性, 同时具有空轨道和占据轨道的硼单原子, 具备了 NRR 催化活性, 进一步通过 $E(N^*)$ 值 (用于评估催化剂的催化活性指标, 该数值越接近钌金属 ΔG 表明其催化活性越强) 计算发现, 负载于单层石墨烯基底的硼单原子催化剂 (G-A), 负载于氮化硼基底的 (BN-A) 和 H 相硫化钼中原子部分被硼取代的硼单原子催化剂 (h-S1) 的 $E(N^*)$ 分别为 -0.45、-0.52 和 -0.54 eV, 均接近 Ru (0001) 的 $E(N^*)$ 值 (-0.46eV), 这一结果甚至比当前已经报道的单原子金属催化剂的性能还要优异, 意味着上述三种催化剂均是潜在优异 NRR 催化剂。通过反应动力学计算模拟进一步发现, G-A 和 h-S1 催化活化氮气的能垒都比较低, 分别为 0.31 和 0.46 eV, 同时催化活化氢的能垒就会高一些, 意味他们更容易催化活化氮气同时抑制竞争性的析氢反应。因此, 综合上述的理论模拟分析可知 G-A 和 h-S1 两种催化剂具备了最优的 NRR 催化活性, 有潜力应用于规模化催化氮还原制氨。该项研究利用理论模拟, 系统研究了三大形态 21 种的硼单原子催化剂氮气催化活性及其反应机理, 筛选出了 2 种具备优秀氮气

⁹ Judith Alvarado, Marshall A Schroeder, Travis P Pollard, et al. Bisalt ether electrolytes: a pathway towards lithium metal batteries with Ni-rich cathodes. *Energy & Environmental Science*, 2019, DOI: 10.1039/C8EE02601G

催化还原活性同时有效抑制析氢副反应的硼单原子催化剂，为开还原氮气制氨提供了全新的高效、经济的催化剂选项。相关研究工作发表在《*Journal of the American Chemical Society*》¹⁰

(刘竞 郭楷模)

¹⁰Chuangwei Liu, Qinye Li, Chengzhang Wu, et al. Single-Boron Catalysts for Nitrogen Reduction Reaction. *Journal of the American Chemical Society*, 2019, DOI: 10.1021/jacs.8b13165

中国科学院武汉先进能源科技战略情报研究中心

中国科学院武汉先进能源科技战略情报研究中心是服务国家和中科院能源决策管理、科技创新、产业发展的专业情报研究机构，历年来承担和参与了多项国家级、中科院、省部级能源科技战略规划和重要科技计划研究。中心的主要产品包括《先进能源发展报告》、《先进能源动态监测快报》（半月刊）、《能源与科技参考》及各类深度能源情报研究分析报告，主要研究方向包括能源科技领域的国际科技战略与规划、科技计划与预算、科技进展与动态、科技前沿与热点、重大成果工程应用、重要科技政策与管理研究。

	研究内容	特色产品
战略规划研究	开展科技政策与科研管理、发展战略与规划研究等相关服务，为科技决策机构和管理部门提供信息支撑。	先进能源发展报告：科技引领能源 国际能源战略与新能源技术进展 金融危机背景下的能源战略 世界能源强国能源科技创新体系分析报告 美国能源科技计划管理机制及启示
领域态势分析	开展特定领域或专题的发展动态调研与跟踪、发展趋势研究与分析，为研究机构、企业的科研项目提供情报服务。	核电技术国际发展态势分析报告 太阳能热发电技术国际发展态势分析报告 智能电网国际发展态势分析报告 规模化电力储能技术国际发展态势分析报告 高端洁净煤发电技术国际发展态势分析报告
技术路线研究	开展产品、成果、专利或标准的情报研究，分析相关行业的现状及发展趋势，为企业发展与决策提供参考。	国际能源领域技术路线图解析 低阶煤热解/气化/循环流化床专利态势分析 新型煤气化技术发展报告 太阳能技术新突破：钙钛矿太阳电池 我国能源互联网发展重要战略问题研究

编辑出版：中国科学院武汉先进能源科技战略情报研究中心

联系地址：武汉市武昌区小洪山西 25 号（430071）

联系人：陈伟 郭楷模 岳芳

电话：（027）87199180

电子邮件：energy@whlib.ac.cn

微信公众号：CASEnergy

