**附表1**

**协会标准项目建议书**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 建议项目名称  (中文) | 梯形异质结界面电子转移测定方法 X射线光电子能谱法 | | | | 建议项目名称  (英文) | | Method for measuring interfacial electron transfer of step-scheme heterojunctions: X-ray photoelectron spectroscopy | |
| 制定或修订 | ☑ 制定 | | □ 修订 | | 被修订标准号 | |  | |
| 采用程度 | □ IDT | □ MOD | | □ NEQ | 采标号 | |  | |
| 国际标准名称（中文） |  | | | | 国际标准名称（英文） | |  | |
| ICS分类号 | 71.040.40 | | | | 中国标准分类号 | | Q04 | |
| 标准主要起草单位 | 中国地质大学（武汉）、云南大学、华中科技大学、中国地质大学（北京）、华中师范大学、长沙学院 | | | | 计划起止时间 | | 2024.8 – 2025.8 | |
| 目的﹑意义或必  要性 | 指出标准项目涉及的方面，期望解决的问题；  光催化技术在治理环境污染和缓解能源短缺方面具有广阔的应用前景和研究价值。单一光催化剂存在光生电子和空穴容易复合的问题，因此光催化性能较差。构建异质结复合光催化剂是促进光生载流子的转移和分离，从而提高光催化性能的有效策略之一。传统的Ⅱ型异质结和Z型异质结机理在热力学、动力学和能量利用等方面都存在着重大缺陷和严峻挑战。  2019年，课题组与标准编制团队提出构建梯形异质结。梯形异质结由一个氧化型光催化剂（OP）和一个还原型光催化剂（RP）构成。RP比OP具有更高的价带、导带和费米能级。当RP与OP接触形成复合物时，由于费米能级差异，RP的电子转移到OP。在界面处，RP一侧由于失去电子而带正电，其费米能级向下弯曲，能带向上弯曲；OP一侧由于得到电子而带负电，其费米能级向上弯曲，能带向下弯曲。结果，在OP与RP的接触界面到达费米能级的平衡，并形成由RP指向OP的内建电场。光照下，OP和RP都被光激发，在价带产生光生电子，在导带产生光生空穴。在内建电场、能带弯曲和库伦吸引力的共同驱动下，OP导带的光生电子转移到RP的价带，并与RP价带的光生空穴复合，同时在RP的导带保留具有强还原性的光生电子，在OP的价带保留具有强氧化性的光生空穴。因此，梯形异质结的形成一方面促进了光生电子和空穴的空间分离，另一方面保持了复合物体系最强的氧化还原能力。发展梯形异质结已经成为设计制备高性能光催化材料的必然趋势。  梯形异质结自被提出后受到了国内外研究学者的广泛关注。已发表的关于梯形异质结光催化剂的论文逐年增多，目前已累计达2000余篇。其中除去综述论文外，约有1800余篇论文是围绕梯形异质结光催化剂的制备、表征和光催化性能开展的实验研究工作。在这些实验研究中，关于光催化机理的探索是研究内容的重点和难点所在，也是深入认识光催化反应过程、推动光催化技术实用化进程的必然要求。异质结光催化机理的核心是电子在两种光催化剂界面的转移过程。如何利用表征技术直观地揭示这一界面电子转移过程，成为了异质结光催化剂领域的关键共性问题。  X射线光电子能谱（XPS）是一种用于分析材料表面的元素组成和元素化学状态的表征技术。其原理是用X射线去辐射样品，使原子的内层电子或价电子受激发射出来。被激发出来的电子称为光电子。测量光电子的动能（*E*k），计算结合能（Binding energy，*E*b）。公式为*E*b = *hν* – *E*k – Ф，其中*hν*为光子能量，Ф为功函数。将结合能作为横坐标，相对强度为纵坐标，即得到光电子能谱图。该表征技术具有灵敏度高、元素定性的标识性强（元素间谱线干扰少）等优点，可用作定性和定量分析。此外，当原子所处的化学环境发生变化，即元素的价态改变时，元素的结合能也会发生变化，这种现象称为化学位移。化学位移的方向取决于原子的电子密度变化趋势。原子周围的电子密度越大，光电子的动能就越大，结合能就越小。总之，结合能的增大（或减小）说明了材料中原子的电子密度减小（或增大），即该材料失去（或获得）电子。  XPS技术在材料研究中的应用非常广泛。在异质结光催化剂研究中，XPS主要有两个作用。一是表征样品的元素组成，用于辅助证明复合光催化剂的成功制备。二是观察复合光催化剂中元素的结合能相对于单一光催化剂中元素的结合能的变化，用于反映形成复合物时两个组分光催化剂之间的电子转移方向。然而，常规的XPS测试是在暗态条件下进行，无法揭示光照时光生电子的转移行为，因此对光催化机理探索的作用十分有限。  国家重点研发计划《高效低成本光催化制氢关键材料及应用》（项目编号2022YFB3803600）包含5个课题，其中课题二《异质结光催化材料光生载流子转移分离的原位表征方法》（课题编号2022YFB3803602）的研究目标之一就是要发展用于揭示梯形异质结界面电子转移的表征技术。  对此，标准编制组在常规XPS测试的基础上，提出了原位光照X射线光电子能谱测试方法，专门用于直接观测梯形异质结光催化剂中光生电子的转移方向。其原理是分别在暗态和光照的条件下测试复合光催化剂的XPS图谱，比较光照前后元素结合能大小，即可获知光照后各组分原子的电子密度变化，从而判断各组分是失去光生电子或获得光生电子。将原位光照XPS与常规XPS测试结果结合起来，即可获取梯形异质结光催化剂光照前和光照后的界面电子转移方向。这种方法已被成功应用于一系列梯形异质结的研究中，例如TiO2/CsPbBr3（Nature Communications, 2020, 11, 4613）、CeO2/g-C3N4（Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59, 5218–5225）、CdS/pyrene-alt-triphenylamine（Adv. Mater., 2021, 33, 2100317）和Zn0.2Cd0.8S/TiO2（Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62, e202313172）等。该方法也被国内外一大批知名专家学者借鉴引用。例如中南大学国家高层次人才计划入选者喻桂朋教授采用该方法揭示了MOF-902/CTF-Th梯形异质结的电子转移机理（Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62, e202304173），日本工程院院士Noritatsu Tsubaki教授使用该方法阐明了CdS/In2O3梯形异质结的电子转移机理（J. Mater. Chem. A, 2022,10, 10715–10728）。总之，结合使用常规XPS和原位光照XPS揭示梯形异质结光催化剂光照前后界面电子转移，已经成为深入研究异质结光催化剂的必备表征方法，在国内外诸多光催化材料研究团队中具有普遍性。  目前，国内关于X射线光电子能谱已形成5项行业标准和20余项国家标准。但是这些标准的内容集中于常规XPS测试的仪器、样品处理、测试方法和数据分析等，例如GB/T 28892-2024《表面化学分析 X射线光电子能谱 选择仪器性能参数的表述》、SJ/T 10458-1993《俄歇电子能谱术和X射线光电子能谱术的样品处理标准导则》、SJ 21627-2021《化合物半导体材料元素化学计量比的X射线光电子能谱测试方法》和GB/T 33502-2017《表面化学分析 X射线光电子能谱(XPS)数据记录与报告的规范要求》等。现阶段我国标准体系中缺乏采用X射线光电子能谱表征观测梯形异质结光催化剂光照前后界面电子转移的方法标准。  本标准拟建立梯形异质结光催化剂光照前后界面电子转移的X射线光电子能谱表征方法，明确测试仪器系统搭建、梯形异质结光催化剂样品前处理、测试步骤、结果分析等过程，达到可操作的目的。本标准的实施对于研究异质结复合光催化剂的载流子转移机理而言具有重要意义，能够为国内外研究机构和团队提供光催化剂的组成结构设计和制备方法方面的指导，推动光催化技术在能源和环境领域的实际应用。 | | | | | | | |
| 范围和主要  技术内容 | 标准的技术内容与适用范围；  1、适用范围  本标准适用于梯形异质结光催化剂光照前后界面电子转移的分析。  2、主要技术内容  本标准对采用X射线光电子能谱表征观测梯形异质结光催化剂光照前后界面电子转移时的方法原理、仪器设备、测试条件、样品制备、测试步骤、结果分析等内容进行了规定。  项目建议性质为强制性，需指出强制内容；  无强制性内容。 | | | | | | | |
| 国内外情况  简要说明 | 1. 国内外对该技术研究情况简要说明：国内外对该技术研究情况、进程及未来的发展；该技术是否相对稳定，如果不是的话，预计一下技术未来稳定的时间，提出的标准项目是否可作为未来技术发展的基础；  该技术已并被国内外同行专家学者广泛直接采用。该技术发展已相对成熟和稳定。目前已被应用于100余种梯形异质结光催化剂的研究中，发表的相关研究论文已达150余篇。有效的指导光催化剂的组成结构设计和制备。  2. 项目与国际标准或国外先进标准采用程度的考虑：该标准项目是否有对应的国际标准或国外先进标准，标准制定过程中如何考虑采用的问题；  本标准项目未查询到对应的国际标准或国外先进标准。  3. 与国内相关标准间的关系：该标准项目是否有相关的国家或行业标准，该标准项目与这些标准是什么关系，该标准项目在标准体系中的位置；  与本标准项目相关的国家或行业标准有20余项，这些已有标准的内容都集中于常规XPS测试的仪器、样品处理、测试方法和数据分析等，完全不涉及本标准项目拟建立的梯形异质结光催化剂光照前后界面电子转移的X射线光电子能谱表征方法。本标准项目与我国现有标准不冲突、不矛盾，且是对现有标准体系的有力补充和完善。  4. 指出是否发现有知识产权的问题。  本标准项目的建立未发现知识产权问题。 | | | | | | | |
| 牵头单位 | （签字、盖公章）月 日 | | | | | 归口管理部门 | | （签字、盖公章）  月 日 |

[注1] 填写制定或修订项目中，若选择修订必须填写被修订标准号；

[注2] 选择采用国际标准，必须填写采标号及采用程度；

[注3] 选择采用快速程序，必须填写快速程序代码。