

光催化还原二氧化碳中的物理原理探索

——从光子能量到材料设计

邱为之

WLSA 上海学校

摘要：光催化还原二氧化碳（CO₂），利用太阳能将温室气体转化为燃料或化学品，是解决能源与环境问题的理想途径。本文聚焦该技术背后的核心物理原理，从光子能量传递出发，深入探讨光生电荷分离与迁移的物理机制，并基于此提出高中生可理解的实验设计思路。通过简单的实验搭建进行论证。研究表明，充分的光吸收、有效的电荷分离与迁移、高效的表面电子传递可显著提升光能利用效率和催化性能。理解并操控这些物理学原理，利用好其低能耗、低成本转化二氧化碳的特性，将推助理动人类社会的可持续发展。

关键词：光催化；物理原理；光催化系统；利用效率

引言：物理视角下的环境挑战

当前，因全球气候变暖，各种因二氧化碳排放所产生的负面效应在我们的社会变得越来越明显。根据有关报告，若不采取有效措施，预计到2100年，全球气温将上升超过2℃，这将对人类的生存环境造成不可逆转的影响。因此，开发和推广有效的二氧化碳处理技术显得尤为重要。在这一背景下，环境可持续发展逐渐成为了当前全球所关注的焦点和社会的主流声音。为了实现可持续发展，我们需要依靠科学技术的支持——而物理学与化学常常在其中扮演着重要的角色。作为研究物质和能量之间相互关系的科学，物理与化学学科也为环境可持续发展提供了许多贡献。但同时，一些现有的环保方法和回收技术也因其存在的各种缺陷面临着一定挑战。

如何处理二氧化碳是当今人类想要实现可持续发展所必须面对的重要课题。然而，传统处理二氧化碳采用的化学方法通常存在能耗、成本较高等问题。相比之下，光催化处理二氧化碳这种新兴技术似乎是一种更好的选择。光催化是一种利用光能作为驱动力，通过催化剂加速化学反应的技术，其核心在于利用光催化剂——通常为半导体材料，如二氧化钛（TiO₂）等在光照条件下催化二氧化碳和牺牲剂产生氧化还原反应。在光照条件下，光催化剂的电子将吸收能量并从价带被激发到导带，在催化剂中产生电子—空穴对。电子—空穴对具有极强的氧化还原能力，能够将吸附在催化剂表面的二氧化碳分子转化为有机物，如甲烷或甲醇等，从而实现二氧化碳的减排和再利用。

光催化技术属于催化化学、光化学、材料科学与物理科学交叉的前沿领域。其核心原理需要应用物理

化学的相关理论知识，即通过光激发半导体材料的价带电子跃迁至导带，形成具有强氧化还原能力的光生载流子，实现对污染物的降解和能源转化。

光催化技术其核心魅力在于可以直接太阳能作为驱动，太阳能作为一种取之不尽用之不竭的清洁能源，有着显著的优势，可能减少对传统化学能源的消耗，反应条件常温常压就可以实现，不需要高温高压等比较严苛的试验反应条件，从而保证了光催化过程的安全性。这使其在拥有低能耗与相对低成本的特点同时符合绿色化学理念。

光催化技术反应机理的研究当前已经取得了一定的成就，但仍然存在着许多的争议和未解之谜。因此本文中，笔者将重点探索光催化还原二氧化碳过程中关键的物理原理，结合物理知识解释光催化反应过程中的关键节点和工作机理，并探索材料设计的物理基础。

1 核心物理原理剖析

1.1 光能捕获与电子激发：光的粒子性与能量传递

爱因斯坦光量子理论：光子能量 $E = h\nu = hc/\lambda$ (h 为普朗克常量， ν 为光频率， c 为光速， λ 为光波长)。物质吸收光子并在满足能量匹配条件时发生电子跃迁：光子能量 \geq 半导体带隙能量 (E_g)。

关键过程：当入射光子能量大于或等于半导体材料的带隙能量 (E_g) 时，价带 (VB) 中的电子被激发跃迁到导带 (CB)，同时在价带留下带正电的空穴 (h^+)。此过程光能 (光子) 被转化为电势能 (电子—空穴对)。

1.2 电荷分离与迁移：电势能驱动电流

载流子动力学：导带电子和价带空穴可以视为载流子。电场力驱动电荷定向移动形成电流。

内建电场驱动：光生电子和空穴因库仑引力倾向

于复合。在PN结或异质结材料中，内部电场能有效分离 e^- 和 h^+ ，防止复合。材料内部的内建电场（如PN结、异质结界面的能带弯曲）或外加偏压可施加电场力，克服库仑引力，促使电子和空穴向相反方向移动（空间分离）。

迁移：在材料表面，能带结构常发生弯曲，形成空间电荷区，促进电荷向特定方向移动。分离后的电子和空穴在导带和价带中分别向材料表面迁移。

1.3 表面反应：电子传递驱动化学转化

关键过程：在催化剂表面发生的化学反应，可以分为还原反应和氧化反应两部分。迁移到材料表面的高能电子（ e^- ）被注入吸附在催化剂表面的 CO_2 分子或其活化中间体（如 CO_2^- ）中。 CO_2 分子获得电子后被还原（发生C-O键断裂，C-H或C-C键形成），生成目标产物（如CO、 CH_4 、 CH_3OH ）。同时，空穴（ h^+ ）通常被牺牲剂（如 H_2O ）消耗，产生氧气（ O_2 ）和质子（ H^+ ）。

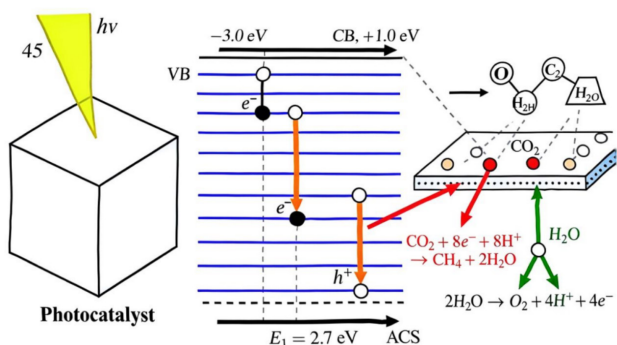
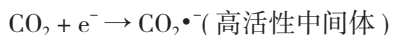


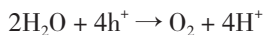
图1 光催化还原二氧化碳原理示意图

其中还原反应： $(e^-$ 参与)： CO_2 分子在催化剂表面吸附并被 e^- 逐步还原。例如：



$CO_2^{\bullet-} + 2H^+ + e^- \rightarrow CO + H_2O$ 或后续步骤生成 CH_4 等。

氧化反应： $(h^+$ 参与)：牺牲剂（通常为水）被氧化提供质子（ H^+ ）和电子源：



即，在这一过程中，存在于材料表面的活性点位的高能电子与吸附的 CO_2 分子结合使其变为活跃的 $CO_2^{\bullet-}$ ，与电子空穴处消耗牺牲剂产生的 H^+ 最终结合产生可被再利用的物质（一般为燃料分子如甲烷 CH_4 ）。

2 实验项目：简易光催化系统搭建与验证

2.1 设计思路

计划通过测量密闭反应体系中气体压强的减少量，来定量计算被消耗的 CO_2 的物质的量。这一设计

是基于理想气体状态方程（ $PV=nRT$ ）所表述的理想气体在恒温恒容条件下，其压强的变化直接正比于其物质的量的变化。

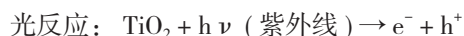
2.2 反应原理

在光照（如紫外光）条件下，光催化剂（如 TiO_2 ）吸收光能产生电子-空穴对，电子将 CO_2 还原为小分子产物（如CO、 CH_4 等），因此可以通过测定反应前后 CO_2 的消耗量，来验证光催化反应是否发生。

CO_2 来源：碳酸氢钠（ $NaHCO_3$ ）与稀硫酸（ H_2SO_4 ）反应。



光催化剂：二氧化钛（ TiO_2 ）。



光生电子（ e^- ）将吸附在催化剂表面的 CO_2 还原。

2.3 实验步骤：

2.3.1 准备与组装

催化剂处理：将 TiO_2 粉末均匀铺在反应瓶底部（或负载在玻璃珠上，方便回收），用去离子水冲洗2次，晾干。

装置连接：按上述流程连接各装置，检查气密性（关闭分液漏斗，捏紧反应瓶橡胶塞，向发生装置加水，观察分液漏斗液面是否下降，不下降则气密性良好）。

2.3.2 CO_2 填充与反应

生成并净化 CO_2 ：打开分液漏斗，使稀盐酸与大理石反应，产生的 CO_2 经净化后通入反应瓶，持续通气5分钟（排尽空气，此时反应瓶内充满 CO_2 ）。

准备反应：关闭分液漏斗和 CO_2 通入导管的止水夹，密封反应瓶，记录此时时间。

光照反应：开启紫外灯和磁力搅拌器（或每5分钟轻摇反应瓶1次），反应30~60分钟（根据光照强度调整）。

2.3.3 CO_2 消耗量测定

吸收剩余 CO_2 ：反应结束后，将反应瓶内气体缓慢通入装有NaOH溶液的吸收瓶（通过支管口连接），通气10分钟确保完全吸收。

称重计算：

称量吸收瓶（含NaOH溶液+干燥管）反应前后的总质量，差值即为剩余 CO_2 的质量（记为 m_1 ）。

另取相同体积的 CO_2 （通过发生装置制备，直接通入吸收瓶），测定相同条件下初始 CO_2 质量（记为 m_0 ）。

$$CO_2 \text{ 消耗量} = m_0 - m_1$$

3 总结与展望

光催化还原二氧化碳的核心物理过程是光能→电

势能 (e^-h^+) → 化学能的转化链。能否实现高效转化的关键在于:充分的光吸收(光子能量匹配)、有效的电荷分离与迁移(内建电场驱动)、高效的表面电子传递(活性位点催化)。

光催化还原二氧化碳尽管前景光明且相较于传统方法拥有多方面的优势,但在技术实现层面仍然存在着很多挑战,光催化还原二氧化碳想要实现广泛推广仍然存在着吸收效率低、产物选择性调控难、规模化控制难等问题。

催化剂的吸收效率会直接关系到技术的可行性,当前多数的半导体材料在可见光区的吸收率低于20%,从而限制了反应效率。产物的选择性难以调控是将来进行市场化的最大障碍,限制了技术的推广,急需突破精准调控技术改变当前困境。由于光催化反应器大多处于实验室,规模材料在实际应用中存在稳定性和和催化剂成本问题,从而制约大规模工业化应用的最大障碍。未来研究将聚焦:

(1) 探索新型的光催化材料体系,如基于新型二维材料、量子点、单原子催化剂等的光催化剂,这些材料具有独特的物理化学性质,通过纳米结构设计、多元材料复合,开发高载流子迁移率、低造价的新材料(如钙钛矿型材料、石墨烯等);

(2) 通过跨物理场协同设计完善催化路径调控模式;

(3) 利用人工智能技术设计最优材料组合和实验系统,从何设计合理的反应温度和光照强度,解决催化剂的规模化制备、反应器的放大设计、成本降低等实际问题。推动光催化还原二氧化碳技术从实验室走向工业化生产,实现产物生成的选择性和产出率;

(4) 设计精准活性位点实现二氧化碳分子的高效活化与定向转化;

(5) 开发集成化系统,将光催化还原二氧化碳同风能、太阳能等清洁能源系统集成,实现规模化将二氧化碳转化为燃料的过程。

未来人类关于光催化技术的研究将致力于开发更高效稳定的可见光响应材料,深入理解原子尺度的电荷转移机制和反应路径,并结合人工智能辅

助材料设计及实验系统设计。笔者认为,作为高中生,理解这些物理、化学的知识有助把握科技前沿,深入了解物理学的核心地位,激发对新能源与环境保护的兴趣与和社会责任感。光催化技术有望成为人类利用太阳能资源、实现绿色可持续发展的重要利器。而从量子力学设计新材料,到热力学优化反应路径,物理则不断为催化技术提供技术创新引擎。

4 结语

全球正加速推进“碳中和”目标,二氧化碳还原技术作为碳循环的关键环节,兼具环境效益与经济价值。光催化还原二氧化碳作为一种直接将太阳能转化为化学能的技术,十分符合社会的发展需求。光催化不仅是化学过程,更是光子、电子与原子尺度相互作用的物理舞台。理解并操控这些原理,利用好其低能耗、低成本转化二氧化碳的特性,将推助理动人类社会的可持续发展,从而实现通过基础科学知识解决人类关键领域的挑战。碳排放不是某个国家或群体的问题,而是全人类共同的责任。只有当技术创新与个体觉醒形成共振,当政策支持与市场机制相互配合,我们才能在这场与时间的赛跑中,为子孙后代留下一个宜居的地球。这不仅是对自然的敬畏,更是对人类自身命运的深刻关怀。让我们从今天开始,用行动守护这颗蓝色星球。

参考文献:

- [1] 刘英,郭建国,王悦,等. $\text{Bi}_2\text{Al}_4\text{O}_9/\beta\text{-Bi}_2\text{O}_3$ 异质结原位构筑及其光催化还原 CO_2 活性 [C]// 中国化学会,中国化学会催化委员会. 第十一届全国环境催化与环境材料学术会议论文集. 河北科技大学,2018:236.
- [2] 邓希. 用于光驱动 CO_2 转化的 MOFs 基催化剂设计与构效关系研究 [D]. 中国科学技术大学,2022.
- [3] 赵仁娜. TiO_2 原子掺杂调控及其氮气还原性能研究 [D]. 山东大学,2022.
- [4] 李奇,李杰浩,白惠敏,等. 催化剂晶面工程在光/电催化中的研究进展(英文) [J]. Chinese Journal of Catalysis,2024,58(3):86-104.