

申报博士研究生指导教师简况表

| | |
|-------------------|----------------------|
| 姓名 | 宋卫余 |
| 专业技术 职务 | 副教授 |
| 一级学科 或 专业领域 | 名称：化学 代码：0703 |
| 二级学科 | 名称：物理化学 代码：070304 |
| 申报类别 | 担任 |
| 是否校外 人员兼职 | 否 |

中国石油大学（北京）学位办公室制表

二零一八年十月八日填

| I 个人概况 | | | | | | | |
|---|-----|--------------------------------|------|---|------------|------------|----|
| 姓名 | 宋卫余 | 性别 | 男 | 出生年月 | 1985-03-06 | 民族 | 汉族 |
| 所在单位 | | 理学院 | | | | 联系电话 | |
| 专业技术职务 | | 副教授 | | 定职时间 | 2015-06-01 | | |
| 行政职务 | | 应化系副主任 | | 任职时间 | 2016-06-30 | | |
| 最后学历 | | 博士研究生 | 最后学位 | 博士 | 毕业时间 | 2014-09-01 | |
| 毕业学校 | | 埃因霍芬理工大学（荷兰） | | 毕业专业 | 物理化学 | | |
| 拔尖人才 | | 2015 年入选校青年拔尖人才，2018 年聘期结题考核优秀 | | | | | |
| 参加何学术团体 任何职务 | | 2015 年至今担任埃因霍芬理工大学客座研究员 | | | | | |
| 连续半年以上在国外高水平大学或著名研究机构从事研究或学习的经历,或在与本专业领域相关的企业一年以上工作经历,或在企业博士后科研工作站从事博士后研究工作的经历 | | | | 2010.9-2014.9, 荷兰埃因霍芬理工大学攻读博士学位 2014.9-2015.3, 荷兰埃因霍芬理工大学博士后研究 | | | |
| II 个人教育与工作经历 | | | | | | | |
| 2003.9-2007.7 山东师范大学 学士 | | | | | | | |
| 2007.9-2010.7 中科院长春应用化学所 硕士 | | | | | | | |
| 2010.9-2014.9 埃因霍芬理工大学 博士 | | | | | | | |
| 2014.9-1015.3 埃因霍芬理工大学 博士后 | | | | | | | |
| 2015.3-2015.6 中国石油大学（北京）理学院 讲师 | | | | | | | |
| 2015.6-至今 中国石油大学（北京）理学院 副教授 | | | | | | | |
| III 本人近四年科学研究情况汇总 | | | | | | | |
| 以第一作者（在第二学科专业申报兼任硕士研究生指导教师的人员本人可以为第一通讯作者，下同）在本学科领域国内外重要期刊发表论文共 6 篇，其中：SCI 收录的期刊论文国外 6 篇、国内 0 篇，EI 收录的期刊论文国外 0 篇、国内 0 篇，SSCI 收录的期刊论文国外 0 篇、国内 0 篇，CSSCI 收录的期刊论文 0 篇，中文核心期刊论文 0 篇（国内外期刊划分以期刊主办单位所在国为准）。 | | | | | | | |
| 获科技成果奖励共 1 项，其中：国家级 0 项，省部级一等 0 项，省部级二等 1 项。 | | | | | | | |
| 作为第一发明人获得本学科领域的发明专利 0 项，实用新型专利 0 项。 | | | | | | | |
| 目前主持科研项目共 2 项，其中：国家自然科学基金项目 1 项，国家社会科学基金项目 0 项，省部级科研基金项目 0 项，校级科研基金项目 1 项。 | | | | | | | |
| 近四年科研经费共 75.20 万元，年均 18.80 万元。 | | | | | | | |

IV 本人近四年发表的具有代表性的学术论文（本人为第一作者或第一通讯作者）

注：请按以下格式填写，并在第一通讯作者姓名右上角标注*，最后的括号里填收录情况

[序号] 全部作者. 题(篇)名. 刊名. 出版年月, 卷号(期号):起止页. 收录情况、JCR 大类分区和影响因子(年份)

第一作者论文:

[1]W. Y. Song, L. Wang, Y. Gao, J. Deng, M. Jing, H. Zheng, J. Liu, Z. Zhao, M. Gao, Y. Wei, Unraveling the structure-sensitivity of the photocatalytic decomposition of N₂O on CeO₂: a DFT+U study, Journal of Material Chemistry A, 2018-9-17.6, 19241-19255. SCI. 第一大区. 9.931 (2018)

[2]W. Y. Song, J. Liu, Z. Zhao*, E. H. M. Hensen. A Mechanistic DFT study of low temperature SCR of NO with NH₃ on Mn-CeO₂(111). Catalysis Science & Technology.2015-11-03.6(7).2120-2128.SCI. 第二大区.5.365 (2018)

[3]W. Y. Song, Y. Q. Su, E. J. M. Hensen. A DFT study of CO oxidation at the Pd-CeO₂(110) interface. The Journal of Physical Chemistry C.2015-11-06.119(49).27505-27511.SCI.第二大区.4.484 (2018)

[4]W. Y. Song, S. Ma, L. Wang, J. Liu*, Z. Zhao. Theoretical Explanation for Photo-Generated Carrier Separation of Surface Junction.ChemCatChem.2017-07-15.9(23).4340-4344.SCI.第二大区.4.674 (2018)

[5]Y. Cheng, W. Y. Song (共同第一作者), J. Liu*, H. Zheng, Z. Zhao, C. Xu, Y. Wei, E. J. M. Hensen. Simultaneous NO_x and particulate matter removal from diesel exhaust by hierarchical Fe-doped Ce-Zr-oxide. ACS Catalysis.2017-04-26.6(7).3883-3892.SCI.第一大区.11.384 (2018)

[6]S. Ma, W. Y. Song (共同第一作者), B. Liu, W. Zhong, J. Deng, H. Zheng, J. Liu, X. Gong, Z. Zhao*. Facet-dependent photocatalytic performance of TiO₂: A DFT study. Applied Catalysis B: Environmental.2016-12-05.198(198).1-8.SCI.第一大区.11.698(2018)

第一通讯作者论文:

[1]L. Chen, W. Y. Song*, M. Jing, H. Zheng, J. Liu, Z. Zhao, Z. Li. Influence of surface termination on formaldehyde oxidation by Mn-doped ceria: A density function theory study. Molecular Catalysis.2018-02-21.448(448).30-37.SCI.第二大区.4.397(2018)

[2]H. Wu, S. Ma, W. Y. Song*, E. J. M. Hensen. Density functional theory study of the mechanism of formaldehyde oxidation on Mn-doped ceria. The Journal of physical chemistry c.2016-05-19.120(24).13071-13077.SCI.第二大区.4.484(2017)

V 本人近四年以第一发明人获得本学科领域的发明专利

[序号] 发明人或设计人, 专利权人, 专利名, 专利号, 公告日期, 授权日期

IX 本人近四年具有代表性的科研成果简介（包括论文摘要、获得省部级及以上科技成果奖励或通过省部级鉴定的科技成果介绍和社会评价等）

| | | | |
|----|-------------|------|-------------|
| 名称 | 氮氧化物还原的催化技术 | 完成时间 | 2017 年 11 月 |
|----|-------------|------|-------------|

氮氧化物（NO_x）是形成雾霾的重要因素之一，催化脱硝技术是最有效的减少 NO_x 污染手段，本成果主要针对高颗粒物浓度下减少 NO_x 排放这一国家重大需求，采用催化方法解决化石燃料燃烧过程中产生的 NO_x 污染问题。掺杂氧化铈材料是一类较有潜力的脱硝催化剂。为了有效设计高效催化剂，需要理解催化反应机理以及掺杂元素所起作用，我们首先针对一类应用较广的催化体系：Mn 掺杂氧化铈，催化 NO_x 还原的反应机理开展了密度泛函理论研究。NH₃ 吸附裂解得到 NH₂ 物种，之后与 NO 反应，裂解生成 N₂。掺杂 Mn 可以有效降低 NH₃ 裂解的能垒从而提高反应速率。此部分工作发表于 *Catalysis Science and Technology*, 2016, 6, 2120（本人第一作者）。

在以上工作基础上，我们设计开发了一种铁掺杂的铈固溶体催化剂，该催化剂可以在较宽的温度窗口（285-400°C）高效消除 NO_x。基于密度泛函理论以及原位表征技术阐明了反应中 NO_x 还原的反应路径：NO 吸附形成硝酸盐物种，NH₃ 吸附裂解生成 NH₂ 物种与硝酸盐物种生成 NONH₂ 活性中间体，随后迅速分解得到 N₂ 与 H₂O。铁的引入可以有效降低氧化铈的氧空穴位形成能，提高反应物的吸附能。此部分工作发表于 *ACS Catalysis*, 2017, 7, 3883（本人作为共同第一作者）。

申请人所在团队从事的氮氧化物催化还原的工作于 2017 年 11 月 30 日获得中国石油与化学工业联合会二等奖。

| | | | |
|---|-------------------------------------|------|----------------|
| 名称 | TiO ₂ 光催化降解污染物中形貌效应的理论研究 | 完成时间 | 2017 年, 2016 年 |
| <p>TiO₂ 的光催化活性与其结构紧密相关, 其催化活性非常依赖所暴露的特定晶面, 然而此现象的实质仍无定论。本部分工作研究了不同的暴露晶面以及表面结对 TiO₂ 光催化活性的影响。光催化反应可分为三个步骤: 光激发、光生载流子转移和光反应。其中, 激发电子的转移主要发生在(101)面和(001)面, 而激发电子在体相之间、体相到表面、表面之间的转移能垒接近, 表明光催化活性的差异与激发电子的转移无关, 光反应过程则可能是速控步骤。本文选用 CO₂ 光还原反应研究 TiO₂ 不同晶面对光化学反应的影响。由于(101)面的导带高从而产生还原性更强的电子, CO₂ 光还原反应能垒低, 产物吸附适中, 因此认为锐钛矿 TiO₂ 的(101)面比(001)面具有更高的反应活性。此部分工作发表于 <i>Applied Catalysis B</i>, 2016, 198, 1 (本人作为共同第一作者)。</p> <p>N₂O 是大气污染物的一种主要形式, 我们利用计算化学技术研究了 TiO₂ 光化降解此污染物中形貌对其影响物理本质。通过对比(101)面和(001)面上热催化, 以及在激发电子存在下的反应势能图, 我们发现激发电子的存在可以有效稳定裂解后的氧物种, 由此极大降低 N₂O 裂解的能垒。而不同晶面也会影响裂解氧物种的稳定性由此会影响反应活性。此部分工作发表于 <i>Nanoscale</i>, 2018, 10, 6024 (本人作为共同第一作者)。我们基于 CeO₂ 光催化降解 N₂O 的研究发现此结论适用于其他的氧化物体系, 即: 裂解氧物种的稳定性会直接影响此反应的动力学性质, 此部分工作发表于 <i>Journal of Material Chemistry C</i>, 2018, 6, 19241 (本人为第一作者)。</p> <p>除了以上影响, 表面结也是一种增加光生载流子(激发电子和光生空穴)分离效率的方法。基于由 TiO₂ 的(101)面和(001)面组成的界面模型的光生载流子分离机制的研究发现, 激发电子和光生空穴都优先占据在(001)面而非(101)面。然而, 界面处的导带能级较高, 抑制了电子在界面之间的迁移。与激发电子迁移过程相反, 界面处的价带能级则允许空穴从(101)面迁移到(001)面。基于这样的界面能带特性, 我们提出一种名为“选择性迁移”结构的新型光催化材料设计概念, 它可以有效促进光生载流子分离并增强激发电子的还原性或光生空穴的氧化性。我们期望以上结果能帮助理解表面结, 并对设计新型光催化剂提供一些指导。此部分工作以内封面的形式发表于 <i>ChemCatChem</i>, 2017, 9, 4340 (本人第一作者)。</p> | | | |

X 本人近四年来在申报的学科专业指导毕业的硕士研究生情况

| 年级 | 学科专业 | 获得学位人数 |
|----|------|--------|
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |

申报人签字： 年 月 日

学院学位评定分委员会审核意见：

学位评定分委员会主席： 年 月 日

学校学位评定委员会审批意见：

学位评定委员会主席： 年 月 日