

人工智能在科学研究中的融合创新应用 ——以双碳目标背景下的二氧化碳电催化还原为例

张浩然, 金亚鑫, 康鹏*, 张生*

天津大学化工学院, 绿色合成与转化教育部重点实验室, 天津化学化工协同创新中心, 天津 300072

摘要: 在全球人工智能技术飞速发展的大背景下, 高校应如何应对时代命题, 将传统科学研究与人工智能结合起来, 快速拓展工科研究生的视野, 激发其创新思维, 提高创新产出效率, 为国家和社会培育出复合型人才, 是目前高校教育所面临的重大挑战。鉴于此, 本文以双碳目标背景下的二氧化碳电催化还原为例, 阐述科学研究融合人工智能提高科研产出和准确性的重要性, 总结了人工智能(AI)计算帮助筛选和预测高性能催化剂, 帮助研究者深入理解复杂反应机理, 优化电解液和设计实验方案等应用, 促进了多学科交叉融合, 为高校工科研究生实验入门提供参考。

关键词: 人工智能; 二氧化碳电催化还原; 碳中和; 催化剂筛选; 电解液优化; 反应机理研究; 实验方案设计
中图分类号: G64; O6

The Convergence and Innovative Application of Artificial Intelligence in Scientific Research: A Case Study of Electrocatalytic Carbon Dioxide Reduction in the Context of the Dual-Carbon Strategy

Haoran Zhang, Yaxin Jin, Peng Kang*, Sheng Zhang*

Key Laboratory for Green Chemical Technology of Ministry of Education, Collaborative Innovation Centre of Chemical Science and Engineering, School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300072, China.

Abstract: Against the backdrop of rapid advancements in artificial intelligence (AI) technology worldwide, universities face significant challenges in addressing contemporary issues by integrating traditional scientific research with AI. This integration aims to broaden the perspectives of engineering graduate students, stimulate innovative thinking, enhance the efficiency of innovative outputs, and cultivate versatile talents for national and societal needs. This paper, using electrocatalytic carbon dioxide reduction (CO₂RR) within the framework of carbon neutrality as a case study, underscores the importance of merging scientific research with AI to augment research output and accuracy. It highlights how AI computing facilitates the screening and prediction of high-performance catalysts, deepens the understanding of complex reaction mechanisms, optimizes electrolytes, and aids in experimental design. Furthermore, it promotes interdisciplinary collaboration and serves as a reference for engineering graduate students embarking on experimental research in universities.

Key Words: Artificial intelligence; Carbon dioxide electrocatalytic reduction; Carbon neutrality; Catalyst screening; Electrolyte optimization; Reaction mechanism research; Experimental plan design

收稿: 2024-12-20; 录用: 2025-04-15; 网络发表: 2025-06-20

*通讯作者, Emails: sheng.zhang@tju.edu.cn (张生); kang.peng@tju.edu.cn (康鹏)

基金资助: 国家重点研发项目(2023YFA1507901); 国家自然科学基金项目(22478289); 国家自然科学基金项目(22078232)

为了有效降低大气中的温室气体含量,全球已形成共识,即通过多元化途径实现二氧化碳的净零排放。碳达峰与碳中和,即“双碳”目标,不仅是推动可持续发展和实现中华民族伟大复兴的关键举措^[1],也是展现我国大国责任和国际担当的重要标志。在这一背景下,可再生能源已成为我国能源发展的主要方向,以助力实现“碳达峰、碳中和”和能源的绿色低碳转型。电力行业作为二氧化碳排放的主要来源,推广绿色电力消费对于能源结构的转型、实现2030年前碳达峰和2060年前碳中和的目标至关重要。

在二氧化碳电催化还原(CO_2RR)技术领域,人工智能(AI)的应用正以惊人的速度推动科学研究和技术创新,彻底改变了传统研究方法,展现出巨大的潜力。因此,国家对于培养未来在人工智能和化工领域具有交叉学科背景的复合型人才的需求迫在眉睫^[2],这是人工智能时代对人才综合能力的要求。但如何使人工智能更多地应用于科学研究,以适应刚刚踏入科学研究领域的研究生,成为当前教育教学探索和改革的重要内容之一。

1 二氧化碳电催化还原的现状和挑战

二氧化碳电催化还原反应(CO_2RR)是一种涉及气体、液体和固体三相的复杂反应,它包含了复杂的热力学和动力学过程,以及众多可能的反应途径和产物,从CO、甲酸、甲醇到长链烃类都有可能^[3]。这一过程在工业应用上面临着活性、选择性、稳定性和经济性等多方面的挑战。 CO_2 作为一个稳定的线性分子,其碳和氧原子之间的距离非常短,仅为0.116 nm。尽管 CO_2 整体上是非极性的,但由于碳和氧的电负性差异,它含有极性键。 CO_2 具有强大的化学键和线性几何结构,这使得它在 CO_2RR 过程中难以被活化,从而导致反应活性较低。目前,用于 CO_2RR 的催化剂种类繁多,包括金属、金属氧化物、合金以及非金属材料,但大多数催化剂在经济性和稳定性方面仍有待提高^[4]。 CO_2RR 的反应条件优化是一个复杂的过程,受电压、电流密度、温度、pH值等多种因素的影响。传统的实验方法筛选最优反应条件既耗时又复杂,而人工智能的快速发展为解决这些问题提供了快速的途径。

尽管 CO_2RR 在实验室中取得了显著进展,并成为行业内热点研究领域,但其在效率、稳定性和经济性方面的规模化应用仍然是一个巨大的挑战,需要进行大量的优化工作。目前,内蒙古伊泰化工有限责任公司联合天津大学和中科合成油工程股份有限公司等单位,采用碳能科技(北京)有限公司自主研发的高效二氧化碳电还原催化剂和透气性强的三维电极,使用新研制的具有柔性结构的电化学反应器,并采用无电解质消耗或排放的工艺流程。自2020年8月正式运行以来,该技术已稳定运行超过1900 h,这标志着 CO_2RR 技术从实验室走向产业化,为实现2026年“碳中和”目标迈出了重要一步,为开发万吨级工艺包和形成成套工业化生产装置奠定了坚实的基础,也为工业化规模的实现描绘了美好的蓝图。

2 AI在二氧化碳电催化还原研究中的应用

2.1 催化剂的设计与发现

在二氧化碳电催化还原(CO_2RR)领域,电催化剂的本征性质对催化过程的反应活性和选择性起着决定性作用^[5]。因此,快速、合理地设计和筛选高性能催化材料是推动 CO_2RR 商业化应用的核心问题。在 CO_2RR 过程中,催化剂的选择至关重要。传统的催化剂发现方法往往依赖于试错,这不仅耗时而且成本高昂,难以在短时间内实现变现。机器学习算法(Machine Learning, ML)是人工智能的核心技术,其核心思想是让计算机从数据中自动发现模式和规律,而不是依赖于显式编程,这样可以实现从大量可能的催化剂中预测出具有高活性和选择性的材料,从而加速从实验室到工业应用的转化过程。一般来说,涉及ML技术的基本工作流程有四个基本阶段:一是目标确定和ML模型选择,二是数据准备和预处理,三是描述符的生成和选择,四是ML模型训练和优化。尽管基于ML的工作流的目标取决于材料问题的类型,如回归或分类,这需要适当地选择一个ML模型来解决特定的材料问题,指导数据的准备和描述符的选择;而 CO_2RR 基于动态和迭代主动学习的ML在效率和精度方面

远远优于传统的试错工作流程，他们可以检查和提取大量高维数据编码的隐式信息和复杂相关性，以提供关于组成-结构-过程-性质关系的创新见解并进行合理的设计^[6]，如图1所示。除此之外，AI还包括其他技术，如符号推理、知识表示、搜索算法、规划和机器人技术等。AI的应用已经取得了一些具体的成功案例，这些案例展示了AI如何加速催化剂的发现和优化CO₂RR的过程。

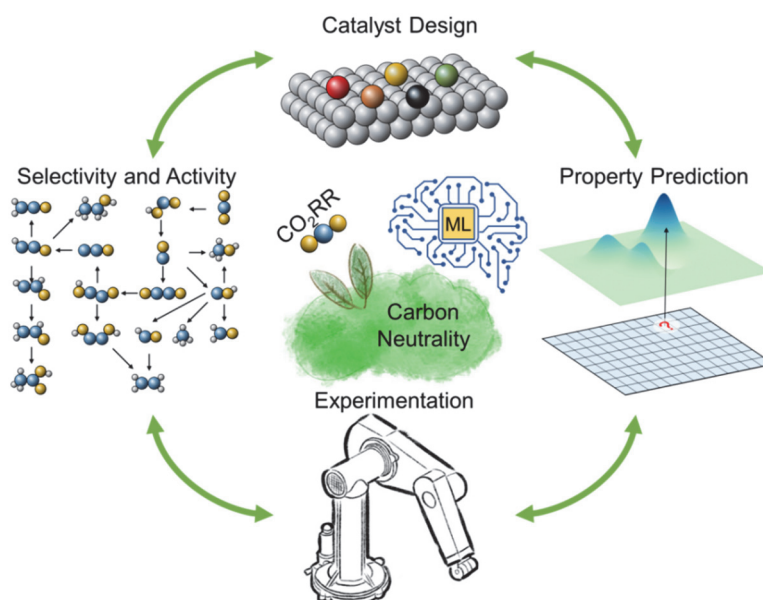


图1 机器学习在碳中和中的作用：催化剂性能预测、设计和合成二氧化碳的合成^[6]

高通量计算(High-Throughput Computing, HTC)是一种面向大规模数据处理和复杂计算任务的计算模式，旨在通过高效的资源管理和调度，实现高利用率、高吞吐量和低延迟的计算目标。作为一种类似于逆设计的方法，一种数据驱动和机器学习支持的高通量虚拟筛选(High-Throughput Virtual Screening, HTVS)策略也已被应用于探索一个巨大的化学空间。HTVS策略包括首先创建材料池，然后进行属性预测。尽管HTVS在技术上不同于逆设计，后者生成的是具有特定性质的材料，但它可以实现相同的基本目标，即在未知的化学空间中识别具有足够广泛的所需性质的材料，而不需要耗时的步骤。结合ML模型和CO₂RR选择性分布图，Dong Hyeon Mok能够对465种金属CO₂RR催化剂进行高通量筛选。这种方法不仅预测了催化活性，还考虑了产物的选择性。例如，Cu-Ga和Cu-Pd合金催化剂因其对C₁₊和甲酸盐的高选择性的优异性能被选出，并通过HTVS进行了验证^[7]。密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)是一种基于量子力学的理论框架，用于研究多体系统的电子结构。它通过电子密度(而非波函数)来描述系统的性质，从而提供了一种相对高效且准确的方法来研究原子、分子以及固体材料的物理和化学性质。尽管DFT在许多情况下计算表现出色，但在处理强关联电子系统(如某些过渡金属化合物)时可能存在不足。基于此，机器学习辅助密度泛函理论展现出显著的优势，不仅提升了计算效率和预测精度，还拓展了DFT的应用范围。有研究调查了在石墨炔单层上锚定的双过渡金属原子(TM1-TM2@GDY)在CO₂RR催化中的基本中间体吸附能之间的相关性，并通过ML辅助的DFT计算，揭示了TM1-TM2@GDY催化CO₂RR的重要描述符，并展示了异核TM1-TM2@GDY在深度CO₂RR中的巨大潜力^[8]。Zheng Li提出了一个整体的机器学习框架，用于快速筛选双金属催化剂，并借助基于描述符的动力学分析。使用甲醇电氧化作为模型反应，机器学习模型使用约1000个理想合金表面的现有数据集进行训练，能够捕捉复杂的非线性吸附物/金属相互作用，并在探索双金属催化剂的广阔化学空间方面显示出预测能力^[9]。

理论研究的流程主要是设计一系列催化剂构型，进行DFT等大数据模型计算与分析，通过对催

化机制研究, 提出描述符, 总结出微观结构与催化性能的构效关系, 并对催化机制进行修改、完善, 预测得到最佳催化剂, 最后进行实验合成及测试, 如图2。这一流程不仅加深了对催化机制的理解, 而且为实验合成和测试提供了理论指导, 从而加速了高性能催化剂的发现和应[7]。

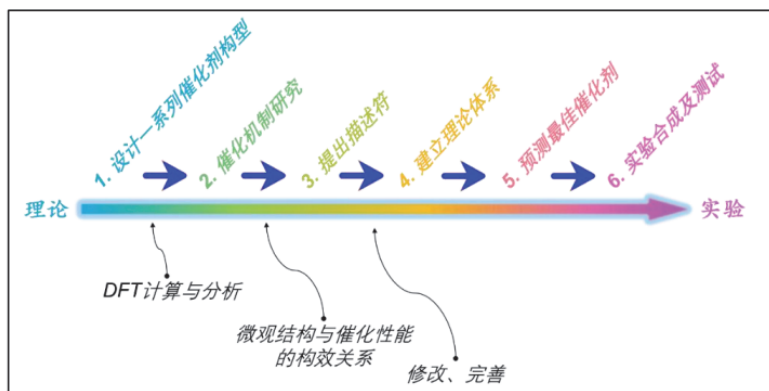


图2 CO₂RR理论到研究的流程图^[10]

目前, 电催化二氧化碳还原反应(CO₂RR)的理论研究的核心任务是揭示催化反应机理, 并探索能将催化剂的几何结构与其催化性能相联系描述符, 用以高效、快速地设计出活性高、性能优异的催化材料。密度泛函理论模拟计算催化剂表面CO₂RR过程的中间体吸附能和基本反应步骤的吉布斯自由能, 有助于推测反应机制潜在的影响因素、明确其中的关键因素。当描述符与催化性能之间呈现出“火山型”关系时, 性能优异的材料条件可以在“火山峰值”附近发现。例如, Nørskov等^[10]曾以*CO中间体的吸附能作为描述符, 将其与CO₂RR基本反应步骤的吉布斯自由能进行关联, 并通过微动力模型计算预测CO₂RR的电流密度和产物选择性, 如图3所示。吸附能(Adsorption Energy, G)是指在吸附过程中, 分子或原子从气相或自由状态吸附到材料表面时所释放的能量。*CO中间体的吸附能(G_{CO^*})与限制电位(Limiting potential, U_L)、电流密度(j_{CO})、产物选择性之间均呈现“火山型”关系。这种“火山型”规律从理论上合理解释了金属催化剂在CO₂RR实验中观测到的活性与选择性差异。

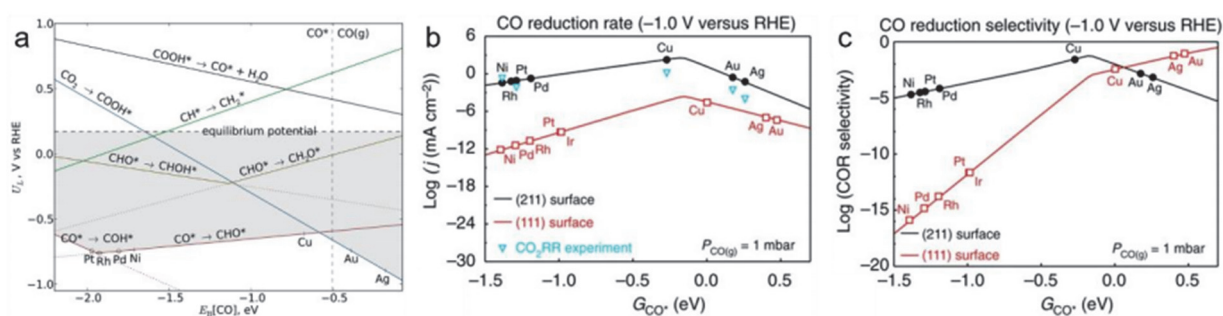


图3 a) 过渡金属催化剂中, *CO中间体的吸附能与电催化CO₂RR过程中各基元反应的自由能的关系^[11]; 通过微动力模型计算得到不同过渡金属电催化CO₂RR的电流密度(b)和甲烷产物选择性(c)^[12]

2.2 电解液的优化

电解液的选择对CO₂RR的效率和选择性有着显著影响。通过运用机器学习模型预测溶剂分子及其相应的电解液性质, 可以深入分析不同电解液成分对反应性能的影响, 从而快速从大量实验数据中学习并预测新配方的性能。

供体数(DN)和受体数(AN)是筛选和设计优质电解液溶剂的关键参数,但通过实验测量这些参数既复杂又耗时。机器学习算法能够学习数据之间的复杂关系,并建立预测模型。Huaping Hu等人^[13]通过机器学习算法建立了电解液溶剂分子供体数和受体数的预测模型,提出了一种使用ML算法预测电解液溶剂分子DN和AN的方法,并利用SHAP (SHapley Additive exPlanations)分析了用于构建模型的分子结构描述符对DN和AN的影响。这种方法能够快速便捷地预测电解液溶剂分子的DN和AN,有助于筛选和设计优良的电解液,为电池电解液溶剂的筛选和设计提供参数。AI技术还可以与自动化设备结合,进行高通量实验,快速筛选和优化化学反应条件。清华大学化工系陈翔-张强课题组发展了电解液还原稳定性、介电常数、黏度等多种性质的模拟计算方法与机器学习预测模型,提出了“人工智能设计锂电池电解液”的新方法。通过高通量计算软件和人工智能设计与实验验证,实现了先进电解液的高效设计。他们开发的分子生成模型和高通量筛选策略,实现了上亿分子空间的性质预测与电解液分子设计^[14]。截至2024年初,软件数据库已经涵盖了24万种以上的电解液分子结构,远超过往百余年锂电池研究史上几千种成分的总和,规模处于全球领先水平。

2.3 反应机理的理解

有研究者利用AI辅助分子动力学(AIMD)模拟,发现Cu表面CO二聚化生成乙烯的能垒较低,并通过原位拉曼光谱实验证实了*OCCO中间体的存在^[15]。基于密度泛函理论的第一性原理计算和分子动力学模拟可以帮助研究者深入理解CO₂RR过程中的复杂反应机理,包括中间体的生成和转化,质子/氢原子供应速率,以及不同反应条件下的动力学行为^[16]。第一性原理方法(First-principles Method)又称为从头算方法,是指从量子力学基本原理出发,利用自洽场方法求解薛定谔方程,不需要任何的经验参数。基于密度泛函理论的第一性原理计算需要消耗大量的算力,分子动力学模拟(Molecular Dynamics, MD)允许我们通过求解经典运动方程来模拟系统内原子和分子之间的相互作用。分子动力学(MD)模拟在为复杂反应途径的阐明和整体电化学性能的预测提供详细的见解方面是非常宝贵的,因此连接了宏观实验观察和微观解释机制^[17]。

在进行分子动力学模拟之前,必须首先建立一个精确的反应体系模型,该模型应包括反应物、催化剂(如果涉及)以及溶剂(如果反应在溶液中进行)。模型的构建必须尽可能准确地反映实际反应体系的原子组成和空间排列。在分子动力学模拟中,力场扮演着至关重要的角色。力场是用于计算原子间相互作用势能的函数,它决定了原子间的相互作用方式,包括化学键的形成与断裂、范德华力、静电相互作用等。因此,选择合适的力场对于模拟的准确性至关重要。在模型建立之后,我们需要设定初始条件,包括温度、压力、初始速度等,这些参数应与实验条件或理论研究的目标相匹配。同时,我们还需设定模拟的时间步长和总模拟时间,以确保能够捕捉到反应的关键过程。在动力学模拟之前,通常需要对系统进行能量最小化处理,以消除任何不良的原子接触或不合理的几何构型,从而得到一个相对稳定的初始状态。如果系统需要从一个非平衡状态开始,可以通过逐步增加温度来进行“加热”,并允许系统达到热平衡。一旦达到平衡,模拟进入生产阶段,此时系统将按照设定的时间步长进行演化。在这一过程中,原子的位置、速度和势能等信息会不断更新,这些信息对于理解反应的详细机理至关重要。在模拟过程中,收集关于原子位置、能量、力以及其他相关物理量的详细信息是必要的,这些数据可以用来分析反应过程中的动态变化,如键长、键角的变化,以及反应中间体和过渡态的形成。通过分析原子运动的轨迹,可以观察到反应过程中的微观事件,如原子的移动、化学键的断裂和形成,以及分子构象的变化。通过计算反应路径上的自由能变化,可以确定反应的活化能和反应热力学性质,这对于理解反应的可行性和速率至关重要。分子动力学模拟的结果需要与实验数据或其他理论计算结果进行对比验证。通过比较,可以对模拟结果的准确性进行评估,并进一步解释实验观察到的现象^[17,18]。

2.4 AI在科学研究应用中的优势与不足

AI在催化剂筛选、反应机理理解和实验优化中展现出巨大潜力,但AI辅助计算还存在模型训练数据的规模和质量参差不齐、建模尺度和难度导致模型泛化能力有限等问题。在催化剂筛选方面,

AI模型依赖训练数据质量，但CO₂RR实验条件，如电位、pH差异会导致数据分散；在复杂反应机理解释方面，黑箱模型缺乏物理解释，导致出现“预测准确但机理模糊”的现象；在电解液优化方面，许多AI预测结果缺乏实验验证，导致预测与实际性能之间存在差距，这无疑也增加了重复的工作量。目前来看，AI应用的性价比问题较为突出，例如一些大模型的使用成本过高，阻碍了其大规模落地；持续的资金和技术投入以及技术快速迭代带来的压力也使得商业化落地面临不确定性。因此其商业化进程仍处于早期阶段，尚未形成稳定、可持续的盈利模式^[19]。

AI的优势主要体现在提高计算效率、实现实验室操作的自动化和智能化、全流程的实验设计和执行能力，以及推动化学合成进入智能化的新阶段。这些优势不仅提高了实验的效率和准确性，还为科学研究开辟了新的可能性。上海交通大学人工智能与微结构实验室通过引入Transformer算法，提出了人工智能模型T-AIMD，提高了分子动力学计算的效率。T-AIMD模型结合序列特征和物理描述符，提高了模型的泛化能力和预测准确性。这种模型能够将传统的从头算分子动力学(AIMD)模拟速度提升100倍以上，显著加速了材料性能的评估过程^[6,20]。英国利物浦大学的研究团队开发了一种“智能实验室”——模块化的移动机器人平台，它可以在实验室中自由移动、自动添加试剂，还能自助分析数据、筛选结果，尤其在使用有机溶剂和处理危险试剂的实验中表现出色。卡内基梅隆大学的研究团队开发了Coscientist——一款基于GPT-4等大型语言模型的AI系统，它可以快速、准确地自主完成从检索信息、规划及设计实验、编写程序、远程操控自动化系统来做实验再到分析数据的一整套流程。层出不穷的智能实验设计不仅可以制定智能化的实验方案，提高实验效率和成果的复现性，而且推动化学合成进入了“智能化”的新阶段。

3 AI在CO₂RR中的未来展望

人工智能和机器学习已经帮助研究人员识别了合适的催化剂并优化了它们的特性^[20]。机器学习是人工智能的一个子集，主要专注于开发算法，从生成的数据集中学习，以做出预测和决策。利用计算机来模拟人类智能，已被应用于实验室中各种电催化剂的高通量计算和表征的自动化，促进了大型数据集的快速生成和分析，加速了有效催化剂的产生，不仅提高了研究效率，还为解决碳中和面临的挑战提供了新的思路 and 工具。

尽管机器学习取得了实际的成功，但其在电催化中的应用仍处于发展的早期阶段，许多研究机会仍未被探索。利用人工智能和机器学习对电催化剂的改进仍有大量的研究空间。这应该改进多步骤的学习过程，以提高ML在寻找有前途的电催化剂方面的效率和准确性，然而这样的研究相当少。2024年进入了新的阶段，ML结合了数据挖掘、主动学习和领域自适应，有效缩小了电催化剂研究的范围^[19,21]。随着AI技术的不断进步，我们有理由相信，它将在未来的科学研究中发挥更加重要的作用，为实现碳中和做出贡献。

在全球人工智能技术革命与“双碳”战略交汇的时代背景下，高校工科教育亟需构建“AI+传统学科”的融合型培养体系，多维路径实现科研与教学的深度革新。首先要进行基础理论模块化升级，开发“AI赋能电化学工程”课程，将密度泛函理论计算与机器学习势函数相结合，通过Materials Project等开源数据库实现催化剂能带结构的AI预测，有团队已经以《电化学基础教程》立体化教材的设计与实施为例运用互联思维打造立体化教材，这已经成为高校教材改革的趋势^[21]。其次将技术方法融合创新，在电催化实验教学中引入机器人流程自动化(RPA)，构建高通量电化学测试平台，开发基于Transformer的文献智能分析工具，指导学生运用自然语言处理技术挖掘近十年*Nature Catalysis*等顶刊中的构效关系^[22]。然后在项目实践中拓展提高，搭建数字孪生电解系统，将实际电解槽运行数据与COMSOL模拟结合，利用强化学习算法优化电流密度分布；构建“技术-经济-政策”三维评估模型，要求学生在催化剂研发中同步进行LCOH(平准化制氢成本)计算和碳税政策敏感性分析，培养多维度能力，引入技术成熟度(TRL)评估体系，建立从实验室制备到中试放大的全链条认知框架。最后注重评价体系革新，采用“过程性评价+颠覆性创新奖励”机制，对突破传统理论框架的非常规思

路给予额外权重；建立学术成果的“环境影响因子”，将CO₂减排潜力纳入论文评价指标，这种培养模式在清华大学深圳国际研究生院的实践中已初见成效。未来教育应着重培养“π型人才”，既深耕专业领域又具备AI素养，最终形成“人类智能引导AI，AI拓展科研边界”的良性循环。

4 结语

在电催化CO₂RR研究中，AI可以处理和分析大量的实验数据，包括电流-电压曲线、光谱数据等，从而提高数据的利用率和研究效率。人工智能/机器学习和高通量虚拟筛选之间的协同作用允许对各种合金组合进行全面筛选，识别出使用传统技术可能被忽视的有前途的高效催化剂候选材料^[22]。除此之外，AI可以帮助优化整个CO₂RR系统的集成，包括电解液的选择、电极设计、反应器配置等，以提高整体的能量效率和产物选择性，例如在能源行业中，特别是在锂离子电池储能技术领域，可以预测不同溶剂对化学反应的影响，帮助选择最佳的溶剂组合；通过AI驱动的机器人实现有机分子的自动合成，加速研究进程并提高合成的精确度和效率，保证合成的安全性；在化学制造过程中的应用案例包括智能化的合成实验室、智能化的生产线、智能化的仓库管理和智能化的环保监测，降低成本并实现绿色生产。最终，AI的应用将会促进化学、物理、材料科学、计算机科学等多个学科的交叉融合，为CO₂RR领域带来了新的研究视角和方法，推动CO₂RR技术的产业化进程，通过优化生产工艺和提高产品质量，降低成本，使CO₂RR技术更接近工业化应用。随着行业的进一步发展，人工智能和机器学习算法的改进，以及在实验条件上的改进，将对克服现有双碳挑战和提高二氧化碳电转换过程的效率和可持续性起到至关重要的作用。

在全球人工智能技术飞速发展的背景下，高校应积极应对时代命题，更新教学理念与目标，培养“π型人才”，强调创新与实践，将传统科学研究与人工智能结合。通过项目驱动式教学和组织小组讨论与合作，利用虚拟实验室与模拟软件，提高学生的实践能力和创新思维^[23]。同时，组建跨学科教师团队，鼓励教师将科研成果转化为教学内容，提高教学的前沿性和实用性。通过这些创新教学方法与手段，可以有效激发学生的创新思维，提高他们的实践能力和团队合作能力，为培养适应时代发展的工科研究生提供有力支持。

参 考 文 献

- [1] 董瑞, 刘洁. 电子商务评论, **2024**, *13* (4), 6143.
- [2] 李平, 尹超. 大学化学, **2024**, *39* (10), 402.
- [3] Yan, T.; Chen, X.; Lata, K.; Lin, J.; Li, M.; Fan, Q.; Chi, H.; Meyer, J. T.; Zhang, S.; Ma, X. *Chem. Rev.* **2023**, *123*(17), 10530.
- [4] Zhang, S.; Fan, Q.; Xia, R.; Meyer, J. T. *Acc. Chem. Res.* **2023**, *53*(1), 255.
- [5] Kuang, S.; Su, Y.; Li, M.; Liu, H.; Chuai, H.; Chen, X.; Hensen, J. M. E.; Meyer, J. T.; Zhang, S.; Ma, X. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2023**, *120* (4), e2214175120.
- [6] Wang, Z.; Sun, Z.; Yin, H.; Wei, H.; Peng, Z.; Pang, Y. X.; Jia, G.; Zhao, H.; Pang, C. H.; Yin, Z. *eScience* **2023**, *3* (4), 100136.
- [7] Mok, H. D.; Li, H.; Zhang, G.; Lee, C.; Jiang, K.; Back, S. *Nat. Commun.* **2023**, *14*, 7303.
- [8] Wu, Z.; Liu, J.; Mu, B.; Xu, X.; Sheng, W.; Tao, W.; Li, Z. *Appl. Surf. Sci.* **2024**, *648*, 159027.
- [9] Li, Z.; Wang, S.; Wei, S. C.; Luke, E. A.; Xin, H. L. *J. Mater. Chem. A* **2017**, *5* (46), 24131.
- [10] 龚乐乐. 高性能CO₂还原电催化剂的理论设计与催化机制研究[博士学位论文]. 北京: 北京化工大学, 2021.
- [11] Peterson, A. A.; Nørskov, J. K. *J. Energy Chem.* **2012**, *3* (2), 251.
- [12] Liu, X.; Xiao, J.; Peng, H.; Hong, X.; Chan, K.; Nørskov, J. K. *Nat. Commun.* **2017**, *8* (1), 15438.
- [13] Hu, H.; Shan, Y.; Zhao, Q.; Wang, J.; Wu, L.; Liu, W. *J. Energy Chem.* **2024**, *98*, 374.
- [14] Gao, Y. C.; Yao, N.; Chen, X.; Yu, L.; Zhang, R.; Zhang, Q. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145* (43), 23764.
- [15] Liu, H.; Liu, J.; Yang, B. *Chinese J. Catal.* **2022**, *43* (11), 2898.

- [16] Fan, Q.; Xiao, T.; Liu, H.; Yan, T.; Lin, J.; Kuang, S.; Chi, H.; Meyer, J. T.; Zhang, S.; Ma, X. *ACS Cent. Sci.* **2024**, *10* (12), 2331.
- [17] He, Y.; Wang, M.; Ji, H.; Cheng, Q.; Liu, S.; Huan, Y.; Qian, T.; Yan, C. *Adv. Funct. Mater.* **2024**, *35* (3), 2413703.
- [18] Lin, J.; Chi, H.; Liu, J.; Fan, Q.; Yan, T.; Kuang, S.; Wang, H.; Li, M.; Yan, Y.; Zhang, T.; *et al.* *AIChE J.* **2024**, *70* (5), e18382.
- [19] Dmitrieva, P. A.; Fomkina, S. A.; Tracey, T. C.; Romanenko, A. E.; Ayati, A.; Krivoshapkina, V. P.; Krivoshapkina F. E. *J. Mater. Chem. A* **2024**, *12* (45), 31074.
- [20] Gao, Y.; Yuan, Y.; Huang, S.; Yao, N.; Yu, L.; Chen, Y.; Zhang, Q.; Chen, X. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *64* (4), e202416506.
- [21] 朱永明, 胡会利, 于元春, 李旭东, 高鹏. *大学化学*, **2024**, *39* (8), 44.
- [22] 谢鸥, 牛雪梅, 曹自洋, 朱淑梅. *创新教育研究*, **2020**, *8* (5), 629.
- [23] Kuang, S.; Xiao, T.; Chi, H.; Liu, J.; Mu, C.; Liu, H.; Wang, S.; Yu, Y.; Meyer, J. T.; Zhang, S.; *et al.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *63* (9), e202316772.