

## “催化科学”重点专项 2023 年度 项目申报指南

(仅国家科技管理信息系统注册用户登录可见)

为落实“十四五”期间国家科技创新的有关部署，国家重点研发计划启动实施“催化科学”重点专项。根据本重点专项“十四五”实施方案的安排，现发布 2023 年度项目申报指南。

“催化科学”重点专项总体目标是：阐明催化反应过程中化学键的活化、定向构建规律和机理，发展相关理论；研制一系列高效催化剂和相关的精准催化过程，实现精细化学品和功能材料生产的技术突破；创新可再生能源催化理论和过程。通过系统任务部署，推动我国催化科学快速发展，在若干重要方向实现引领；促进高效清洁催化技术转移转化，为我国经济社会绿色和可持续发展提供科技支撑。

2023 年度指南围绕催化基础与前沿交叉、催化剂创制、催化原位动态表征与模拟、可再生能源转化与存储的催化科学、化石资源转化的催化科学、环境友好与碳循环的催化科学等 6 个重点任务进行部署，拟支持 21 个项目，拟安排国拨经费概算 3.72 亿元。同时，拟支持 8 个青年科学家项目，拟安排国拨经费概算 3200 万元，每个项目 400 万元。

项目统一按指南二级标题（如 1.1）的指南方向申报。每个指南任务原则上支持 1 项（有特殊说明的除外）。在同一研究方向下，当出现申报项目评审结果前两位评价相近、技术路线明显不同的情况时，可考虑支持 2 个项目。2 个项目将采取分两个阶段支持的方式，第一阶段完成后将对 2 个项目执行情况进行评估，根据评估结果确定后续支持方式。

申报单位根据指南支持方向，面向解决重大科学问题和突破关键技术进行设计。项目应整体申报，须覆盖相应指南方向的全部研究内容。项目执行期一般为 5 年。一般项目下设课题数原则上不超过 4 个，项目参与单位总数不超过 6 家。项目设 1 名负责人，每个课题设 1 名负责人。

青年科学家项目支持青年科研人员承担国家科研任务，本指南方向 7 可作为青年科学家项目组织申报。青年科学家项目参与单位总数不超过 3 家，不再下设课题。项目设 1 名项目负责人，青年科学家项目负责人年龄要求，男性应为 35 周岁以下（1988 年 1 月 1 日以后出生），女性应为 38 周岁以下（1985 年 1 月 1 日以后出生）。原则上团队其他参与人员年龄要求同上。

本专项所有涉及人体被试和人类遗传资源的科学研究，须尊重生命伦理准则，遵守《中华人民共和国生物安全法》《中华人民共和国人类遗传资源管理条例》《涉及人的生命科学和医学研究伦理审查办法》《人胚胎干细胞研究伦理指导原则》等国家相关规定，严格遵循技术标准和伦理规范。涉及实验动物和动物实验，

要遵守国家实验动物管理的法律、法规、技术标准及有关规定，使用合格实验动物，在合格设施内进行动物实验，保证实验过程合法，实验结果真实、有效，并通过实验动物福利和伦理审查。

## 1. 催化基础与前沿交叉

### 1.1 非周期晶格氧催化反应

研究内容：在原子和纳米尺度上设计和构建金属氧化物表面晶格氧的非周期性化学微环境，有效调控晶格氧的催化活性，增强晶格氧活性中心的抗毒化能力及目标产物的选择性，发展在温和反应条件下实现重要能源与环境反应的高效催化体系；针对饱和烷烃惰性 C-H 键活化需要高温、强氧化剂或紫外光的挑战，通过引入高氧化性晶格氧物种，发展甲烷等饱和烷烃高选择性制烯烃、氢气的温和转化路线，探索天然气的低能耗制氢与碳协同转化新原理和新方法。

考核指标：建立金属氧化物晶格氧的活化和催化新规律，发展晶格氧活度的综合评价方法，构建单晶相多金属氧化物（金属种类  $\geq 5$  种）复合催化剂，应用于 2~3 类重要的能源与环境低温催化反应体系；在低贵金属含量（ $\leq 0.5\text{wt}\%$ ）和温和反应条件（ $\leq 200^\circ\text{C}$ ）下，实现催化甲烷等饱和烷烃协同制备烯烃与氢气（烯烃选择性  $\geq 50\%$ ）。

关键词：晶格氧，金属氧化物，氧化脱氢

### 1.2 超结构仿酶催化剂创制

研究内容：针对有机小分子催化模式少、效率低、工业化应

用受限等问题，基于生物酶催化的基本原理，创制具有超越生物酶结构和超越有机小分子催化剂功能的新型仿酶催化剂；以药物活性分子和天然产物关键结构单元构建为目标，开发仿醛缩酶、转氨酶、磷酸化酶、羟基化酶和质子化酶等催化新体系，特别是发展挑战性季碳、螺碳和杂原子中心的三维精准构筑新方法；实现超结构仿酶催化剂应用于重要活性天然产物高效合成重磅药物的规模化制备。

考核指标：创制 4~5 类全新超结构仿酶催化剂，要求原料易得、合成简便和可公斤级规模制备；基于开发的仿酶催化剂，发展 4~5 类经济高效的仿酶催化新反应，收率 > 90%，立体选择性 > 95%，在同样反应中所设计的仿酶催化体系成本低于酶催化体系；实现若干药物（如索非布韦、氟苯尼考、高三尖杉酯碱等）的公斤级合成。

关键词：仿生催化，化学酶，药物合成，天然产物

### 1.3 活细胞中的人工催化

研究内容：构建可用于活体环境的人工催化体系，发展干预活细胞生命过程的技术和方法。开发与活体细胞兼容的人工催化体系，实现对活性分子的原位合成、生物大分子功能的实时调控以及生命过程的动态解析；利用人工催化体系，实现描绘生物大分子的分布及生物学事件、持续性原位合成生物活性分子、开发新型生物治疗途径等应用。

考核指标：建立若干（包括金属催化、有机催化、光催化和

人工酶催化等)可用于活细胞的新型催化体系;发展3~5类利用人工催化体系在活体环境合成和调控活性分子的新方法,开发3~5种利用人工催化体系调控和解析活细胞内生物大分子功能和动态分布的化学工具,开发2~3种具有临床应用潜力的生物治疗创新途径。

关键词: 生物正交反应, 活细胞人工催化, 非天然酶, 活体分子创制

## 2. 催化剂创制

### 2.1 单原子催化涉氢反应研究

研究内容: 面向精细化学品绿色制造和氢能领域中的涉氢反应,发展单原子配位环境和活性位密度可控的催化材料制备方法;研究单原子配位微环境对金属-载体电子相互作用、氢溢流效应和催化反应活性/选择性的影响和调控规律,阐明涉氢反应过程中的活性位结构和微环境的动态演化机制,认识影响单原子催化剂反应稳定性的关键因素,提出构建兼具高活性/高选择性/高稳定性的单原子催化剂新理论和新策略,并在1~2个重要工业应用反应中得到验证。

考核指标: 针对1~2个具有重要工业应用的涉氢反应过程,创新3~5种单原子催化剂制备方法,在原子和分子尺度获得活性位微环境结构在反应过程中的动态演化规律,实现在典型工业反应条件下的活性/选择性/稳定性等性能优于现有的纳米催化剂体系,节约贵金属资源20%以上;实现优选单原子催化剂的吨级放

大和至少一种涉氢反应的示范应用。

关键词：单原子，涉氢反应，催化理论，原子经济性

## 2.2 手性催化剂协同体系研究

研究内容：针对传统单一手性催化剂在底物活化和选择性控制方面的局限，创制金属/金属、金属/有机小分子以及化学/生物催化剂等相互协同的手性催化剂体系，探索新型协同催化过程中化学键断裂、电子传递以及基团转移的作用新机制，发展单一手性催化剂无法或者难以完成的多样性、发散性和精准性不对称催化高效合成反应，实现上述手性催化剂协同体系在重要药物规模化制备中的应用。

考核指标：创制 3~5 类新型高效的手性催化剂协同体系；发展 6~8 种基础有机分子的多样性、发散性和精准性不对称催化转化新反应；实现贝达喹啉、莫西沙星和青蒿素等重要药物的公斤级合成。

关键词：协同催化，金属催化，有机小分子催化，生物催化

## 2.3 生物质基平台化合物定向转化的稀土基催化剂

研究内容：设计新型稀土基催化剂（如稀土基合金、稀土基功能载体负载金属催化剂等），发展催化剂精准制备方法；针对生物质基平台化合物定向转化制备化学品等重要反应，聚焦 C-O/C-C 键选择活化等关键科学问题，研究催化剂的结构、亲氧能力和酸碱性等与催化性能之间的关系以及稀土组分的调变作用机制，发展绿色高效的新反应过程；开发高效稳定稀土基催化剂

制备的关键技术，为产业化应用提供相关参数。

考核指标：创制 3~5 种高效稳定的稀土基复合催化剂，阐明催化剂构一效关系及稀土组分的调变作用机制，实现葡萄糖、甘油、山梨醇和呋喃二甲酸等重要平台化合物高效催化转化制备丙二醇、己二醇和己二酸等重要化学品，目标产物收率达到 85% 以上，催化剂稳定使用超过 100 小时不发生明显失活。

关键词：生物质平台化合物，二元醇，有机酸，稀土基催化剂，构效关系

### 3. 催化原位动态表征与模拟

#### 3.1 催化剂理性设计软件的开发

研究内容：采用基于第一性原理和机器学习势函数的理论计算方法，结合高通量计算和人工智能技术，发展高效、系统的多相催化剂在真实反应条件下的原子模拟和多尺度原位动态模拟方法，开发相应的计算软件平台；发展多相催化工况下复杂反应网络的构建方法，建立与显微学/谱学等实验手段进行验证的接口方案；发展多相催化构效关系的构建方法，建立可以解释并用于关联理论可计算量和实验可观测量的函数模型，形成新一代多相催化剂的理性设计方案；开发具有可拓展性、可与实验软件平台交互的催化剂设计软件平台，开拓知识和数据协同驱动的催化剂智能设计。

考核指标：开发国产或者发展基于开源软件的结构计算及多尺度原位模拟软件，实现万个原子以上复杂催化体系在杂化

泛函等量子化学精度下的微秒级模拟，实现复杂催化体系在真实工况条件下的原位动态模拟；开发大规模催化过程计算软件和催化反应数据分析平台，搭建云与超算兼顾的混合云智能算力平台；建立碳基能源分子催化转化专题数据库，针对 1~2 个重要的碳基能源分子催化转化体系，筛选出 2~3 种新型催化剂，并实现理论模拟与实验测得的活性高度吻合。

关键词：催化剂构效关系模拟，工况条件，催化剂设计软件，人工智能，高通量计算

### 3.2 电化学表界面多尺度动态表征新方法

研究内容：发展固液电化学界面工况下催化剂活性位结构动态变化、吸附物种构型演变和能量电荷转移等过程的多尺度（空间与时间）表征新方法；发展表征局域电场对电催化过程速率、选择性和机理的影响以及在工况下对电化学微观反应环境直观、高效动态监测的新方法；针对实际应用中的典型电化学能源器件，发展能够实时监测膜电极的电化学光谱/质谱联用技术。

考核指标：实现对电催化固液界面结构和动态反应过程进行高时间分辨表征，对界面微观反应环境在纳米级/近原子级空间分辨率上进行可视化实时监测；利用电化学—光谱/质谱联用技术实现对实际工作电化学能源器件进行实时跟踪，最大工作电流不小于  $1\text{A}/\text{cm}^2$ ，对于使用聚合物电解质工况体系不引入液态小分子电解质等干扰因素，金属检出限  $0.1\text{ppb}$ 。

关键词：电催化界面，多尺度表征，动态监测



### 3.3 光生载流子的迁移和复合动力学

研究内容：针对半导体光催化反应中电荷迁移和复合过程，发展超越经典近似、多自由度耦合的大尺度非绝热动力学方法；搭建时空协同、高分辨的光谱和成像实验平台；通过理论和实验双向互动，探究非平衡、非绝热和超快的电荷迁移和复合动力学机制；揭示电荷、晶格、轨道、自旋等多自由度耦合对光生电荷迁移和复合动力学的影响规律；阐明界面电荷转移微观机制及光生电荷参与表界面催化分子反应动力学过程，为研发性能优异的半导体光催化材料提供可靠的理论和实验依据。

考核指标：建立声子模式分辨、电-声耦合、自旋-轨道耦合及外场参与的非绝热动力学模拟方法，开发具有自主知识产权的相关软件；建立 sub-1ps 和 sub-300nm 时空分辨率的瞬态光谱显微学方法或 sub-1ps 和 sub-10nm 时空分辨率的瞬态电子显微学方法，建成紫外-太赫兹波段、fs-ms 时间窗口的光谱仪系统或建成具备二次电子成像、阴极荧光成像和 fs-ms 时间窗口的超快扫描电子成像系统。

关键词：半导体光催化，非绝热动力学，光生电荷迁移，自旋-轨道耦合，瞬态光谱

## 4. 可再生能源转化与存储的催化科学

### 4.1 高效稳定光电催化分解水制氢

研究内容：针对太阳能光电催化分解水制氢反应体系效率低和稳定性差等问题，创制新型宽光谱高活性、高稳定性的光电催

化光阳极和光阴极体系；阐明影响光电催化分解水系统寿命的关键因素，揭示表面重构和质子耦合电子转移对光电极稳定性的影响规律，探索提高光电极稳定性的方法，发展催化剂自修复方法，实现高效超长寿命光电催化分解水系统；发展高效稳定的多结耦合光电催化分解水集成体系；开展光电催化分解水制氢的基础研究、器件开发与技术研究；研制无偏压光电催化分解水制氢器件，并研究其在工况运行条件下的稳定性。

考核指标：在标准太阳光辐照下，太阳能到氢能转化效率  $\geq 5\%$ ，构建无偏压光电催化分解水制氢器件和装置系统，器件光照面积  $\geq 25\text{cm}^2$ ，工况条件下器件稳定运行超过 500h，生产每公斤  $\text{H}_2$  的成本比直接电解水降低 30%以上；进一步构建多结耦合光电催化分解水制氢体系和器件，太阳能到氢能转化效率  $\geq 10\%$ ，器件光照面积  $\geq 100\text{cm}^2$ ，工况条件下器件稳定运行超过 1000h。

关键词：光电催化，分解水，制氢器件

#### 4.2 光电催化地球丰量小分子耦合有机底物的资源化转化研究

研究内容：利用太阳能、电能等可再生资源，将  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{N}_2$  和  $\text{SO}_2$  等自然界储量丰富的小分子通过与有机底物耦合的形式进行资源转化。针对光电催化小分子直接制能源分子及化学品过程中选择性差、种类有限、分离困难等挑战，研究  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{N}_2$  和  $\text{SO}_2$  等分子活化过程中的中间体与有机底物耦合反应机理和路径，开发具有实际应用价值、高转化率与高选择性的绿色催化合成工艺路线。

考核指标: 获得 10 种以上高效光电催化剂, 发展 2~3 种  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{N}_2$  或  $\text{SO}_2$  还原或氧化耦合有机底物的新途径, 有机底物转化率及选择性 > 95%, 稳定运行超过 100h (效率衰减 < 20%), 在可见光工作条件下, 扣除电化学贡献后太阳能利用效率大于 1.5%。

关键词: 光电催化, 小分子活化, 耦合有机反应

### 4.3 绿氢/碳酸盐自催化还原炼制机制与碳减排

研究内容: 建立绿氢—碳酸盐热解过程的先进供热和自催化还原炼制原创技术; 阐明碳酸盐热解过程中 C-O 键的自催化活化机理, 确定碳酸盐热解自催化反应窗口和矿相演变规律, 建立催化全过程模拟仿真模型; 明确硅、铝和铁等元素的化学状态及其结构微环境对碳酸盐热解自催化还原的适应性。

考核指标: 建立绿氢—碳酸盐热解自催化还原制低碳水泥熟料新技术体系, 结合熟料煅烧工艺设计先进热解耦合自催化还原反应装置, 开展规模试验, 在模拟真实过程的进料速度条件下, 实现生料自催化分解温度降低  $200^\circ\text{C}$  以上,  $\text{CO}_2$  直接排放减少 95% 以上, 自催化产生的 CO 选择性大于 95%。

关键词: 碳酸盐, 还原炼制, 绿氢, 水泥, 源头减排

### 4.4 电解水制氢耦合催化选择氧化

研究内容: 针对电解水制氢的阳极析氧反应过电位高、产氧价值低的问题, 发展与电催化制氢相匹配的大宗、高附加值、高选择性电催化阳极氧化反应。通过耦合有机合成、生物质转化等

反应，降低电解水过电位，提升产氢效率，揭示阳极选择性氧化反应和阴极制氢反应的协同机制；匹配电解反应器中电解液、隔膜等单元，开发完整的制氢装置。

考核指标：在电流密度  $> 500\text{mA}/\text{cm}^2$  条件下，阳极氧化反应电位相比电解水析氧反应降低  $> 100\text{mV}$ ，阳极底物转化率  $> 85\%$ ，产物选择性  $> 90\%$ ，产物法拉第效率  $> 90\%$ ，阴极制氢  $\text{FE} \geq 99\%$ ，阴极氢气纯度  $> 99.9\%$ ；针对年市场容量在万吨以上的大宗化学品的电氧化体系，构建电解原型器件和功率  $\geq 10\text{kW}$  的装置，能耗  $\leq 4.0\text{kWh}/\text{Nm}^3\text{H}_2$ ，实测连续运行时间  $\geq 1000\text{h}$ 。

关键词：电解水，选择氧化，耦合体系

## 5. 化石资源转化的催化科学

### 5.1 碳资源高效利用中 C-C 可控偶联催化机制及关键技术

研究内容：面向碳资源高效利用的重要催化过程，针对 C-C 键偶联的活性和选择性调控的关键科学问题，开展基于分子筛等具有孔道限域结构催化材料的可控制备，实现活性位点精准构筑，研究金属或金属氧化物与酸性位的协同作用对 C-C 偶联的调控规律，揭示活性与选择性耦合控制原理并发展高效的解耦方法，从原理上创制高效、稳定的多功能纳米复合催化剂。

考核指标：针对合成气直接制烯烃、 $\text{CO}_2$  耦合烯烃转化制 BTX 等碳资源高效转化反应，创制 2~4 种高效纳米复合催化剂，形成 C-C 键可控偶联的基础理论；合成气直接制烯烃在  $\text{CO}$  单程转化率  $> 80\%$  条件下，低碳烯烃的烷基选择性  $> 80\%$ ； $\text{CO}_2$  耦合烯烃

转化制 BTX 选择性 > 80%; 发展催化剂共性制备技术并应用于重要催化反应。

关键词: 碳资源分子, C-C 偶联, 孔道限域, 双功能催化剂

## 5.2 低碳烃的催化羰基化反应研究

研究内容: 针对大宗精细化学品和高分子材料单体的合成, 发展低碳烃特别是 C4 烯烃羰基化制备戊醛、己二醛、己二酸或己二胺等催化羰基化新体系和高效过程。设计合成高效实用的新型配体和金属催化剂, 发展调控金属一氢、烷基金属、酰基金属等活性中间体的策略, 建立酰基金属试剂的形成、转化及淬灭的选择性控制新模式, 实现混合 C4 烯烃催化合成戊醛的模式试验。

考核指标: 发展 3~5 个烃类的羰基化新催化体系; 开发 2~3 条农药、精细化学品和高分子材料单体的羰基化合成新技术路线; 氢甲酰化反应催化活性 TOF > 4000/h, 选择性 > 95%。

关键词: 羰基化, 低碳烃, 金属催化剂, 精细化学品, 高分子材料单体

## 5.3 渣油直接转化制化工原料新催化体系构建

研究内容: 针对渣油低碳绿色转化过程的关键科学问题, 发展适合渣油低碳定向加氢转化的催化材料和催化反应体系, 建立沸石分子筛材料的精准合成与结构调控方法, 突破现有分子筛合成极限; 发展以沸石分子筛为结构单元的自组装方法, 揭示多级结构定向组装规律和机制; 阐明渣油大分子定向加氢转化的复杂反应网络和基元反应特征, 建立沸石分子筛结构与催化效能之间

的关联，揭示催化反应机理；发展雏晶分子筛规模化制备技术，实现渣油制化工原料高效定向转化。

考核指标：创制 3~5 种渣油直接转化高效催化剂，揭示渣油大分子定向转化反应机理，建立催化剂结构与催化性能之间的构效关系；形成雏晶分子筛基催化剂的吨级制备技术，构建渣油直接转化制化工原料新催化体系，利用减压渣油直接进行评价，吨油催化剂消耗不超过 0.8 公斤；沥青质转化率不低于 80%，胶质转化率不低于 90%，产物油的金属（Ni+V）含量不高于 10 ppm，可作为催化裂解原料；350°C 以上催化裂解原料收率不小于 65%。

关键词：渣油加氢，雏晶分子筛，定向催化转化

#### 5.4 外场强化作用下高性能分子筛催化材料的调控

研究内容：针对目前分子筛生产过程存在结构调控手段单一、反应周期长、三废排放多的问题，采用外场强化方法，对分子筛合成过程的混合、传递和晶化过程进行微观强化，建立以外场强化为基础的高性能分子筛绿色合成新方法。研发外场强化技术，揭示外场强化对多相粘性体系的混合—传递—晶化—反应性能的影响规律，实现对分子筛结构和性能的精准调控，形成外场强化的高性能分子筛催化材料绿色合成技术。

考核指标：开发不少于 3 类外场强化制备分子筛新技术，较传统生产过程晶化时间缩短 30% 以上，模板剂用量降低 30% 以上；高性能分子筛用于生产烯烃和芳烃的反应过程，主产物选择性提高 10% 以上；完成外场强化分子筛合成关键生产过程的放大试验，

实现吨级宏量制备。

关键词：外场强化，分子筛合成，高性能催化材料，烯烃芳烃转化

### **5.5 强吸/放热催化微区热耦合机制研究**

研究内容：聚焦强吸/放热过程的热耦合效应对反应过程安全与能耗的影响。重点针对低碳烃类加/脱氢等典型强吸/放热反应热与传热的非线性耦合问题，发展研究催化微区反应热和反应进程变化的耦合原位表征技术和多尺度理论分析方法，揭示催化微区反应热与传热的演变规律；明确催化微区结构对强吸/放热反应与传热的作用机制，建立催化剂的热学性质调控策略和工程制备方法；设计匹配热耦合过程的热交换方式和反应形式，开发绿色能源技术和过程强化手段，实现典型强吸/放热反应系统的节能减排和高效稳定运行。

考核指标：针对典型催化微区热耦合体系，发展 1~2 种反应微区原位热量测量方法和技术，量热精度 $\pm 100\text{nW}$ ，温度精度 $\pm 0.1^\circ\text{C}$ ；针对典型强吸/放热催化反应，建立绿色安全放大示范装置。

关键词：微区反应热，热耦合，多尺度理论分析，过程强化

## **6. 环境友好与碳循环的催化科学**

### **6.1 催化剂—绿色溶剂体系构建及反应的溶剂效应研究**

研究内容：设计具有不同结构特征的离子液体、水、生物质基溶剂及其构成的混合溶剂体系，研究体系中分子间相互作用和微观结构；设计制备新型催化剂；构建绿色溶剂—催化剂体系，

研究绿色溶剂中 CO<sub>2</sub>、生物质催化转化制备重要化学品和燃料的反应；研究绿色溶剂对催化剂性能调控作用，以及溶剂与反应物、反应中间体、产物的相互作用对化学反应动力学和热力学性质的影响，揭示绿色溶剂与催化剂协同催化反应的规律和机制、反应的溶剂效应，发展溶剂强化催化反应理论。

考核指标：发展系列绿色溶剂体系，构建绿色溶剂—催化剂耦合体系，获得 CO<sub>2</sub>、生物质催化转化制备酸、醇、酚、酯和烯烃等反应的新路线，在绿色溶剂物理化学性质、绿色溶剂对反应的强化作用及其与催化剂的协同作用规律和机理方面取得新认识。其中电催化 CO<sub>2</sub> 还原制 C<sub>2+</sub>醇的法拉第效率 ≥ 85%，电流密度 ≥ 800 mA/cm<sup>2</sup>；CO<sub>2</sub> 光催化转化制备甲酸的选择性 ≥ 90%，生成速率 ≥ 100 mmol/g/h；木质素制酚类化合物的质量收率 ≥ 50%；CO<sub>2</sub> 和低碳醇（甲醇、乙醇）反应制碳酸酯的转化率 ≥ 50%，产品选择性 > 90%，并在百吨级装置上获得验证及应用。

关键词：绿色溶剂，催化反应，溶剂效应，催化剂

## 6.2 典型工业烟道气高值化利用关键催化材料及过程强化技术

研究内容：针对 1~2 种典型工业烟道气中碳资源直接转化制备高值化学品，设计高效电、热催化剂，发展烟道气碳资源高值化利用新方法和新路线，研究催化剂种类、烟道气组成与温度等条件对反应的影响规律，以及工况条件下催化剂的活性与稳定性；探索催化剂的构效关系和反应机制，揭示催化表/界面反应与传递的耦合及时空动态匹配规律；建立催化剂—介质—反应器跨尺度



优化方法和新路线，开发相关技术。

考核指标：获得不少于 10 种高效催化剂以及相关反应路线，建立反应器的跨尺度模型及动态优化方法，揭示工况条件下烟道气催化定向转化机制。建成百吨级烟道气电催化制  $C_{2+}$  化合物的反应装置，转化率  $> 60\%$ ，并稳定运行超过 1000 小时；对于热催化反应，烟道气与富氢弛放气耦合，实现二氧化碳（或一氧化碳）与氢气、烯烃、胺反应制备醇、醛、N,N-二甲基甲酰胺等，选择性  $> 95\%$ ，转化率  $> 60\%$ ，其中至少一个体系实验室放大条件下稳定性超过 1000 小时。

关键词：烟道气， $CO_2$ ，电催化，热催化， $C_{2+}$  化学品

### 6.3 生物质催化转化制航空煤油关键技术研究

研究内容：针对生物质转化制航空煤油设计高效催化体系，研究其对以秸秆、林木为主的木质纤维类生物质催化转化性能以及反应条件对航空煤油收率的影响规律，阐明反应过程中不同碳物种的活化状态及界面催化结构对中间体转变过程的作用机制，建立催化剂规模化制备技术以及反应器跨尺度优化方法，开展全流程系统能量优化与原料碳原子利用率研究；开发具备大规模工业应用前景的生物质催化转化制航空煤油技术。

考核指标：在催化剂组成及结构对反应活性和产物分布影响机制取得新认知，开发不少于 5 种高效催化材料，获得 2~3 种生物质制备航空煤油技术路线；以秸秆、林木为主的木质纤维类生物质为原料，获得航空煤油产品原料碳原子利用率不低于 17%；

在万吨级生物质制航空煤油装置上得到应用，稳定运行 5000h 以上。

关键词：木质纤维类生物质，催化剂，航空煤油

## 7. 青年科学家项目

### 7.1 过渡金属高熵合金及化合物催化体系

针对过渡金属高熵合金及化合物催化剂的可控合成及其催化过程的复杂效应仍不明晰等关键科学问题，发展高活性、高稳定性的过渡金属高熵合金和化合物电催化剂，用于电解水制氢。通过理论计算模拟，发展能够高通量筛选过渡金属高熵合金及化合物电催化剂的方法；建立过渡金属高熵合金和化合物电催化剂的组分和结构可控合成的普适方法；研究高熵合金和化合物的组分及元素比例、表面性质及结构等对电催化性质的影响规律和机制；结合理论模型及原位在线技术，识别不同高熵体系的催化活性位点，研究催化过程中高熵合金催化界面活性位点的动态演变及内在机制；研究高熵电催化剂在工况下的物理、化学稳定机制；探索高熵合金及化合物催化剂设计、构建和研究的新理论和新方法。在电流密度不低于  $500\text{mA}/\text{cm}^2$  的条件下，电解水的电耗达到 4.1 度电/标方氢。

### 7.2 低温氮氧化物高效脱除催化剂研究

针对现有催化技术对氮氧化物在低温（ $\leq 150^\circ\text{C}$ ）段无法进行有效脱除的科学难题，发展全新的低温氮氧化物高效脱除技术路线。发展高效低温氮氧化物还原催化剂，揭示氮氧化物在催化

剂表面的吸脱附机理，研究催化剂活性中心与分子筛等载体表面酸碱位点和氧物种的相互作用机理，解析催化还原反应的构效关系；创制高存储容量、高存储速率、长寿命的新型氮氧化物存储材料，探究氮氧化物存储与选择性催化还原耦合反应中的吸脱附动力学与反应动力学的相互作用规律，实现机动车冷启动低温氮氧化物的高效催化脱除。

### 7.3 生物质平台分子光催化定向合成高附加值化学品

针对生物质平台分子（如甘油、葡萄糖、乳酸等），利用可见光催化技术，高效、精准定向一步合成在生物医药、功能材料等领域具有重要价值的含氮、磷或硫等化学品，如氨基酸等，发展反应新路线；设计高效光催化剂，研究催化剂结构与性能的关系；利用原位表征技术和计算化学，揭示光生电子和空穴的协同作用机制，阐明 C-O/C-C 键选择性活化和 C-X（X=N、P 或 S）键选择性形成的规律，使反应机理向纵深发展，反应产物向商业化发展。

### 7.4 稀土基催化剂在碳基能源高效转化中的利用

围绕能源高效转化利用，开发新型稀土基催化剂。聚焦 C-O 键的断裂和 C-C 键的偶联，利用稀土独特的 4f 电子结构、氧化还原性和配位不饱和等特点，精准确定催化转化中关键中间体（\*COOH、\*CHO 等）的化学信息，探究 CO<sub>x</sub> 催化转化制备高品质化学品反应过程，揭示稀土原子在中间体吸附、转化和脱附过程中的重要作用与机制，提高多碳产物的选择性，实现 CO<sub>2</sub> 的绿

色、高效转化。

### 7.5 环境友好储能高分子材料的催化合成

针对目前储能高分子材料难以实现有效的降解回收且电化学性能较差等问题，发展“单体创制—聚合方法开发—储能应用”的全链条路径，获得高性能、可降解的聚合物有机电池材料。以大宗工业品为原料，利用连续相邻碳氢键催化活化、脱氢环化等重要策略，发展烯基及烷基的直接双/多官能团化新方法，构建新型功能化聚合单体；开发功能化单体的催化聚合新体系和新方法，合成拓扑结构精准可控的聚合物固态电解质和电极材料；明确高分子结构与电化学、降解等性能的内在联系，为催化合成环境友好聚合物有机电池材料提供新思路。

### 7.6 糖类化合物的精准催化合成研究

均质糖类的规模化获取是限制糖科学乃至整个生命科学研究的重要瓶颈。针对糖类高效催化合成和精准修饰的关键科学问题，研制高活性和高选择性的催化剂和催化体系，实现糖类催化合成中的选择性控制。区别于亲电取代糖苷化方法，开发新型催化糖苷化方法，建立高度模块化的糖苷化精准催化合成平台；创制高选择性的多重协同催化体系和高活性的糖基酶，实现无保护糖的直接催化转化，高效获得糖类药物分子；开辟糖类化合物与多肽、蛋白质及核酸等生物大分子高效精准连接的催化新方法，搭建结构多样的糖蛋白和糖 RNA 的化合物库，并解析糖基化的重要生物学功能，开发糖类药物分子。

## 7.7 金属中心手性络合物的不对称合成

金属中心手性金属络合物在无机药物化学、发光材料以及催化科学等领域具有重要的应用价值，但针对此类物质的不对称合成依然存在方法单一、效率低下等问题。开发不对称催化新方法，进行手性过渡金属络合物的高效与精准合成；研究建立不对称配位催化的新概念和新体系。基于上述研究，进一步探索金属中心手性络合物在催化和无机药物化学等领域的应用；并以金属中心手性络合物作为组装基元，构筑兼具高光学活性和动态调节性的手性自组装材料。

## 7.8 多相催化自旋选择性加氢反应研究

针对催化反应痕量中间体检测和基元反应过程研究的难题，基于仲氢成对加成的超极化效应，精确调控多相催化体系活性氢物种表界面反应性质，发展可实现自旋耦合氢原子对的高活性、高选择性加氢的多相催化体系；开展原子分辨的结构表征和活性位点轨道/自旋性质研究，结合自旋动力学研究和理论计算，揭示多相催化体系自旋调控机制。