

# “催化科学”重点专项 2022 年度

## 项目申报指南

### (征求意见稿)

“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。

2022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26个项目，同时拟支持20个青年科学家项目。

指南方向7是青年科学家项目，也可参考重要支持方向（标\*的方向）组织项目申报，但不受研究内容和考核指标限制。青年科学家项目不再下设课题。

## 1. 催化基础与前沿交叉

## 1.1 高效人工光合作用催化体系研究

**研究内容：**开展仿叶绿体催化反应器的研究，开发具有高能量转化效率、模拟生物催化反应器功能的人工光合反应体系。针对太阳能光催化CO<sub>2</sub>还原制化学品效率低的挑战，发展新型多金属催化中心协同光催化体系，高选择性生产CO、甲酸、甲醇等化学品；探索催化中心与光捕获中心在微纳尺度上有效集成的新方法；发展新型半导体Z型异质结的构筑策略，提高光催化CO<sub>2</sub>还原效率；建立高时空原位技术探究光催化反应过程与中间体，揭示工况条件下光合作用催化体系的作用机制。

**考核指标：**开发2-3个人工光合作用新体系，实现高效、高选择性CO<sub>2</sub>还原制备CO、甲酸、甲醇等化学品，太阳能制化学品效率超过2%，产物选择性>90%，建立可规模化应用示范装置，标准太阳光下稳定运行100小时以上。

## 1.2 仿生限域超流界面化学反应

开展纳米限域超流化学反应研究，发展高产率、高选择性和低能耗的定向输运化学反应技术。建立限域通道的尺寸、表面化学结构、通道内的反应物分子通量、反应物状态等参数与化学反应速率、产率和立体选择性等性能之间的关系；构建高反应产率（约100%）、高选择性（约100%）和低能耗（室温）的膜反应体系，并阐明仿生限域超流化学反应机理；通过精确调控界面结构、浸润性与外场（光、电、热），实

现目标产物的高通量、高选择性催化合成，揭示三相等界面物理传质与化学转化全过程的微观动力学机制。

### **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等应用。

**考核指标：**建立若干（包括金属催化、有机催化、光催化、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细胞内生物大分子功能和动态分布的化学工具。

### **1.4 基于催化数据库和AI策略的大规模模拟方法\***

选择1-2个典型的选择性氧化/加氢等催化体系，建立系统完整的催化剂组成、结构和性能等数据库，发展新型计算策略，通过神经网络和机器学习的方法，发展催化剂和催化反应过程的先进模拟软件和方法，并具有广泛的应用性和普适性。

## **2. 催化剂创制**

### **2.1 丰产金属催化有机合成**

**研究内容：**针对贵金属资源匮乏、价格昂贵、生物兼容性差的挑战，研究新型高活性丰产金属催化剂，高效实现原本由贵金属催化剂完成的反应，探索基于丰产金属的独特新反应；建立催化剂活性及选择性调控新方法、新策略、新机制，阐明催化剂构效关系；发展单核、双核、多核以及多功能等高效催化体系。

**考核指标：**设计合成3-5类适配于丰产金属的特色配体，创制5类以上可用于羧化、氧化、还原等具有重要工业应用价值反应的新型高效丰产金属催化剂以及催化体系。实现5种以上精细化学品、重要药物和材料分子合成中稀有金属和贵金属催化剂的替代。

## 2.2 手性多孔晶态催化材料的创制

**研究内容：**发展新型手性位点单分散的多孔催化材料，发现兼具高效选择富集与活化特性的异相不对称催化新体系和新机制，理解限域空间内的手性传递放大规律；开发拓扑导向的多孔晶态材料的高效合成和宏量制备方法，实现限域微反应空腔内多级次手性位点的精准构筑，制备结构稳定、功能集成的多尺度、多维化和多组分手性催化材料。

**考核指标：**获得3类以上化学稳定性高（酸和碱中稳定>6个月，空气中稳定>1年）和比表面积大（>1000 m<sup>2</sup>/g）的晶态催化材料；针对2-3类重要的形成碳-碳键和碳-杂键的、CO和CO<sub>2</sub>等气体参与的异相不对称催化反应，在温和条件下（反

应温度 $< 50^{\circ}\text{C}$ 、反应压力 $< 20$ 个标准大气压)实现高效率(转化率 $> 99\%$ )、高对映体选择性( $> 99\%$  ee)和高循环稳定性(转化数TON $> 10000$ )的分子转化和高附加值手性化学品的合成。

### 2.3 面向重要催化过程的介孔催化材料的创制\*

**研究内容:** 针对高效介孔催化材料制备和应用的关键科学问题, 发展介孔催化剂的精准合成与结构调控方法, 变革传统催化材料合成-结构表征-性能测试-材料合成的“试错法”, 探索以实验测量的活性描述符为基础的介孔基金属催化加氢材料理性设计原则; 揭示孔道对催化反应性能增强的作用规律和失活机制; 阐明介孔孔道限域结构中活性位点的动态变化规律, 发展面向重要催化加氢过程的介孔催化材料性能调控和组装策略, 创制稳定、高效的介孔催化材料, 形成规模化制备技术, 实现自主创新的最佳催化剂载体。

**考核指标:** 发展3-5种介孔基金属催化加氢材料及工业催化剂, 实现活性描述符、金属物种、孔道结构的关联测量; 面向乙烯焦油等劣质重芳烃加氢裂解制轻质芳烃等化学品, 开展工业装置试验, C9+转化率 $\geq 80\%$ , BTX收率 $\geq 60\%$ ; 针对吡啶基等化合物选择催化加氢过程, 实现催化剂公斤级制备, 及50 L反应体系的验证, 单程产品收率要求超过95%。

### 2.4 生物基醇类化合物定向转化的稀土型催化剂

**研究内容:** 设计新型稀土基催化剂, 发展催化剂精准制备方法; 针对生物质基醇类平台化合物(乙醇、甘油、山梨

醇等)定向转化制备化学品(乙酸酐、丙烯酸、丙二醇、己二醇等)等重要反应,聚焦C-O键选择活化等关键科学问题,研究催化剂的结构、亲氧能力、酸碱性等与催化性能之间的关系以及稀土组分的促进作用机制,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-效关系及稀土组分的促进作用机制,实现乙醇、甘油、山梨醇等重要醇类平台化合物高效催化转化制备乙酸酐、丙烯酸、丙二醇、己二醇等重要化学品,目标产物收率达到>85%。

## 2.5 一步法催化乳酸制备丙交酯

**研究内容:**开发乳酸“一步法”制备聚合级丙交酯催化新工艺。研究分子筛等催化剂结构、组成对反应性能影响的机制;开发反应选择性及收率最优的分子筛等催化剂及相应的催化剂成型工艺;研究成型催化剂在生产过程中的传热、传质问题,实现催化反应过程强化;设计并建造适合分子筛等催化乳酸制备丙交酯的新型装置并完成实验室中试。

**考核指标:**开发1-3种高效催化乳酸“一步法”制备聚合级丙交酯的分子筛等催化剂原粉及成型催化剂,打通新工艺中试全流程,全工艺流程收率 $\geq 95.0\%$ 、丙交酯化学纯度 $\geq 99.5\%$ 。

## 2.6 高效偶联反应催化剂

**研究内容：**聚焦合成药物和有机材料的重要反应体系，构建基于芳基/烷基卤代物及其类似物的碳-氮、碳-氧和碳-碳键的偶联反应，开发更加高效实用的新型配体与金属催化剂；拓宽催化偶联反应的底物范围，发展普适的适用价廉易得的芳基/烷基氯代物的偶联反应催化体系，研究配体参与的偶联反应催化模式和规律。

**考核指标：**发展金属催化新体系，TON最高达10万以上。在此基础上发展3-5个药物、有机材料和其它化学品的创新生产工艺，并实现工业化应用。

### **3. 催化原位动态表征与模拟**

#### **3.1 反应工况条件下催化过程的精准表征与模拟**

**研究内容：**基于大科学装置等先进的表征平台，充分利用多种谱学/显微学联用优势，对真实反应工况条件下重要催化反应进行动态表征；创新表征方法阐明催化反应活性中心和反应物分子等在时空和能量匹配的物理化学机制；研究反应气氛和环境与催化剂表界面结构的相互作用；发展催化动力学分析的新技术并量化催化剂动态结构与原位动力学信息之间的内在联系；发展准确描述催化剂结构动态变化的新模型和新概念。

**考核指标：**针对气固和液固等实际催化反应，发展可在常压至兆帕、高温条件下表征催化剂和反应物种的谱学/显微学联用技术，并实现对反应过程的高空间（纳米级）和时间

分辨（毫秒级）跟踪。

### 3.2 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载流子迁移和复合过程，发展超越经典路径近似、包括自旋-轨道耦合作用的非绝热动力学理论方法，创制具有自主知识产权的软件；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，探究非绝热、非平衡和超快的载流子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载流子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依据。

**考核指标：**对于半导体光催化材料，实现简正模式分辨、电子-核自由度耦合和单态-三态系间窜跃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；研制小于5 ps和400 nm时-空分辨率的瞬态吸收显微镜，搭建240 nm-20  $\mu\text{m}$ 光谱波段、fs-ms时间窗口的光谱仪系统。

### 3.3 金属团簇催化研究

**研究内容：**设计制备原子数目和组成精确可控的金属团簇催化剂，研究金属团簇对烃类、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ 转化反应的催化性能；发展团簇催化原位与动态实验表征新技术和理论模拟新方法，建立团簇催化实验和理论数据库；揭示金属团簇催化性能与组成、尺寸、电子结构和物理化学环境的关



系，发展团簇精准催化转化新理论；针对特定反应，实现金属团簇催化剂的逆向设计，合成多种高性能团簇催化剂。

**考核指标：**发展1-2种金属团簇催化原位与动态实验表征新技术，建立1-2套金属团簇结构和反应性能模拟新程序，建立1个团簇结构与反应活性数据库并建立共享网站；建立1种以上团簇结构-催化性能预测模型，能够高通量筛选金属团簇催化剂并得到实验验证；针对烃类、CO<sub>2</sub>、CO等重要分子催化转化，发展10种以上组成多样、结构新颖的金属团簇催化材料，并发展相关高效催化反应。

## **4. 可再生能源转化与存储的催化科学**

### **4.1 电解水制氢耦合催化选择氧化\***

**研究内容：**针对基于可再生能源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、塑料降解等反应，降低电解水过电位，提升产氢效率，揭示氧化反应和质子还原反应的协同机制；匹配电解反应器中电解液、隔膜等单元，开发完整的小试装置。

**考核指标：**实现制氢电耗 $\leq 4.0$  KWh/Nm<sup>3</sup>H<sub>2</sub>；在电流密度 $>500$  mA/cm<sup>2</sup>条件下，阳极选择性氧化FE $>90\%$ ，阴极制氢FE $\geq 99\%$ ，阴极氢气纯度 $>99.9\%$ ；构建功率 $\geq 10$  kW的电解原型器件。

## 4.2 阴离子交换膜电解水制氢研究\*

**研究内容：**发展基于廉价丰产元素的高效析氢、析氧电催化剂理性设计方法及宏量可控制备策略，研制高离子电导率、高稳定性阴离子交换膜，研究电催化剂与碱性固态电解质相界面电荷传输和气体扩散行为；发展电催化反应过程强化策略，阐明固态电解质体系中电催化剂的结构动态演化规律和失效机制；构筑适用于波动输入功率工况的低能耗阴离子交换膜电解水器件。

**考核指标：**揭示非贵金属电解水催化剂的构效关系，提出电催化活性的多维度描述因子。在 $1\text{ A/cm}^2$ 电流密度条件下，析氢/析氧过电位低于 $100/400\text{ mV}$ 。膜电导率 $\geq 40\text{ mS}$ ， $1000$ 小时衰减 $\leq 10\%$ 。发展固态电解质电解水原位表征技术，空间分辨率 $\leq 3\text{ nm}$ 。研制 $10\text{ kW}$ 级电解水制氢系统，电耗 $\leq 4.1\text{ kWh/Nm}^3\text{H}_2$ ，功率可在额定功率的 $20\%-120\%$ 范围内调节。

## 4.3 动力型锂离子电池的催化反应机理

**研究内容：**聚焦下一代高能量密度、快充型(-)磷|钴镍锰酸锂(+)动力电池体系，针对磷负极多步锂化/脱锂化反应动力学过程缓慢的问题，开发高效金属基催化剂，研究催化剂对P-P和P-Li键的活化机理，指导优化磷负极反应路径，促进中间体转化，实现多步反应的动力学过程强化，提升快充性能；针对正极脱锂过程中亚稳态结构催化氧化电解液形成固态界面层，不稳定的界面层导致可逆比容量低、衰减快

的问题，通过温度等物理场调控正极能带结构和电子自旋态，建立调控正极/电解液界面反应的新方法，优化构建稳定界面层，提升可逆比容量。

**考核指标：** 催化剂引入实现磷负极3C快充条件下容量25%以上提升，达到比容量 $\geq 800$  mAh/g；物理场强化实现钴镍锰酸锂正极可逆容量15%以上提升，达到比容量 $\geq 200$  mAh/g；组装软包叠片全电池（电芯容量 $\geq 5$  Ah），实现能量密度 $\geq 360$  Wh/kg。

#### 4.4 电催化精准合成高附加值有机化学品

**研究内容：** 以发展具有商业化前景的高附加值有机化学品的绿色电合成工艺为目的，研究不同类型有机电催化反应过程中反应物、中间体和/或产物在电极/电解质溶液界面的选择性氧化、还原机理，构建高效有机电合成体系；研制系列具有应用前景的高效长寿命的电催化电极材料，发展模块化高效电催化有机合成装置，实现高安全性、高可靠性、高选择性、高收率、低能耗和低原子消耗的高附加值有机化学品电催化精准合成；耦合可再生能源，开发具实际应用价值的绿色有机电合成工艺路线，实现示范性应用。

**考核指标：** 在电流密度 $\geq 100$  mA/cm<sup>2</sup>、工作电极面积 $\geq 1$  m<sup>2</sup>、转化率 $> 80\%$ 、稳定性 $> 1000$ 小时的条件下，实现醛类、胺类、酯类等高附加值精细化学品、大宗化学品的绿色生产，建成吨级工程示范装置。

## 5. 化石资源转化的催化科学

### 5.1 烃类不对称催化转化

**研究内容：**烃类化合物是重要的化工原料，通过创制具有独特立体电子性质的新型手性配体和催化剂，对自由基等中间体的活性进行调控，建立Csp<sup>3</sup>-H、Csp<sup>2</sup>-H、Csp<sup>3</sup>-Csp<sup>3</sup>、Csp<sup>2</sup>-Csp<sup>2</sup>等化学键的活化新方法和转化过程立体控制新模式，实现烷烃和烯烃直接不对称催化转化，为高附加值手性化学品提供高效、精准和绿色的合成途径。

**考核指标：**发展3-5个烃类化合物直接不对称催化转化新反应；开发2-3条手性医药、农药、精细化学品和中间体的不对称催化合成技术路线。

### 5.2 高效加氢处理催化材料及过程研究

**研究内容：**聚焦油品加氢过程氢气高效利用与碳减排问题。根据产品和原料的结构组成，从理论上确定炼油主要加氢工艺过程最优氢耗并建立模型；开展加氢处理催化材料精细结构表征、各主要加氢反应动力学交叉影响研究，发展加氢处理催化材料精细结构精准制备和精准后修饰方法；针对1-2种油品，开发显著降低氢气消耗的选择性加氢反应新工艺。

**考核指标：**实现新加氢处理催化剂及过程在百万吨级加氢装置上的工业应用，实现氢气利用率较现有水平提高20%以上。

### 5.3 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确控，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：**高性能分子筛用于生产烯烃和芳烃的反应过程，产品收率提高10%以上。

#### **5.4 低碳烃类加/脱氢催化微区热耦合机制研究**

**研究内容：**聚焦低碳烃类催化加/脱氢过程的热耦合效应对反应过程安全与能耗的影响。针对低碳烃类催化加/脱氢过程中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，实现典型低碳烃类加/脱氢反应系统的节能减排和高效稳定运行。

**考核指标：**发展1-2种反应微区原位热量测量方法和技术，

量热精度 $\pm 100$  nW，温度精度 $\pm 0.1^\circ\text{C}$ ；针对低碳烃类催化加/脱氢的典型强吸放热反应，建立1-2个高效绿色安全示范工程。

### 5.5 甲烷C-H的高效催化活化和定向转化

针对甲烷C-H键高效活化和甲烷定向转化的难题，发展热催化，以及与其它外场耦合方法，构建限域配位不饱和金属中心，发展甲烷无氧或有氧低温绿色转化过程，实现甲烷的催化转化，高效制取高值化学品或液体燃料；开发1-2种甲烷转化催化剂和催化过程，达到甲烷选择转化效率的世界前列；揭示甲烷C-H键活化的催化作用本质和中间体转化的基本规律。

## 6. 环境友好与碳循环的催化科学

### 6.1 $\text{CO}_2$ 与不同物质反应制备多碳化合物\*

**研究内容：**针对 $\text{CO}_2$ 与水、生物制基化合物、其它有机物等反应生成多碳醇、多碳酸、多碳烃等化合物，设计热、电、光催化剂，研究催化剂的组成、结构与催化性能的关系，催化剂各组分间的协同作用规律，催化剂与反应介质耦合规律，发展新的高效反应路线；探索 $\text{CO}_2$ 活化以及中间体形成和转化的热力学和动力学，阐明反应机制，形成 $\text{CO}_2$ 催化转化的新概念和新理论。

**考核指标：**获得10种以上高效催化材料，发展10种以上 $\text{CO}_2$ 与水、生物质基化合物、其它有机物等反应生成多碳产物的高效反应路线。其中 $\text{CO}_2$ 与水反应制备乙酸的法拉第效

率高于50%，电流密度高于200 mA/cm<sup>2</sup>，稳定100小时以上；CO<sub>2</sub>与有机物反应制备C<sub>3</sub>+醇的法拉第效率高于80%，电流密度高于200 mA/cm<sup>2</sup>；CO<sub>2</sub>与醇反应生成多碳酸的产率大于80%；实现1-2种CO<sub>2</sub>催化转化合成高价值多碳化合物新反应路线的模式装置或中试装置，并稳定运行。

## 6.2 面向重排放工业减排增效的热分解耦合催化还原

**研究内容：**针对水泥、钢铁、耐材等过程的大量CO<sub>2</sub>排放，利用碳酸盐热解产生的余热共热，实现碳酸盐热解耦合催化还原。明确碳酸盐热解过程中表面碳物种的活化状态及其与供氢分子的原位作用机理，控制其定向转化途径与转化效率；揭示共热前提下耦合炼制过程的还原反应机制，在降低还原炼制反应温度的同时提高本质安全性；通过碳酸盐分解工程热化学反应体系热量恒算与余热分析，建立相关理论模型与耦合反应热力学数据库；发展2-3个碳酸盐热解共热耦合还原炼制的新技术示范体系，构建费托合成/甲烷转化平台。

**考核指标：**碳转移温度较原脱碳温度降低100℃以上；碳酸盐共热分解CO<sub>2</sub>减排90%以上；实现碳酸盐共热分解规模化生产，完成年处理量达吨级的中式装置。

## 6.3 CO<sub>2</sub>催化加氢高效合成甲醇

**研究内容：**聚焦利用源于可再生能源的绿氢与CO<sub>2</sub>反应制甲醇的体系。针对现有Cu基、In基和Zn基催化体系普遍存在选择性差、反应温度高、易失活等问题，发展可以大规模

工业化的热催化CO<sub>2</sub>制甲醇新催化剂体系和相应技术。

**考核指标：**实现在较低温度下，CO<sub>2</sub>单程转化率大于20%、甲醇选择性大于95%、甲醇时空收率大于0.50 g<sub>MeOH</sub> g<sub>cat.</sub><sup>-1</sup> h<sup>-1</sup>、寿命大于5000小时；建立1-2套催化剂放大制备方法，实现百公斤级放大制备，完成单管原颗粒催化剂测试。

#### **6.4 生物质定向催化转化制备高附加值含氧化学品**

**研究内容：**针对纤维素、半纤维素、木质素及其衍生物定向催化转化制备醛类、2,5-呋喃二甲酸、呋喃甲酸、酮类化合物等，设计负载型单一金属和多金属催化剂；研究催化剂对上述反应的催化性能，发展新的高效反应路线；研究催化剂组成、结构与性能的关系，以及催化剂各组元间的协同作用规律，探索C-O、C-H等化学键的活化转化规律和催化反应机理。

**考核指标：**开发6种以上负载型高效催化材料，获得6种以上生物质及其衍生物催化转化制备醛、2,5-呋喃二甲酸、呋喃甲酸、酮等化合物的新反应路线。在C-O、C-C键等化学键的精准活化与转化规律和机理、催化剂构效关系等方面取得新的认识。开发至少一项千吨级中试技术。

### **7. 青年科学家项目**

#### **7.1 磁场与自旋调控光催化有机合成研究**

针对工业应用光催化有机反应中对高量子效率与高选择性的迫切需求，基于自由基对机理，发展磁场调控反应手



段，创制自旋催化反应体系，实现光催化有机合成能量效率与选择性的提升；利用时间分辨谱学研究反应自旋动力学，揭示磁场和自旋催化剂调控反应中间体自旋态机理，探究自旋相关光催化有机反应中的自旋动力学、反应动力学和扩散动力学的相互作用规律，认识其对反应效率和选择性的作用机制。

## 7.2 气-液-固界面结构及其催化反应的高空间分辨研究

聚焦液-固、气-液-固界面电催化反应中的模型催化体系，发展基于微纳器件的电催化微反应池。开发基于微纳器件模型催化体系的高分辨原位表征手段，实现界面催化结构以及反应产物探测的高空间分辨研究，发展原位实时研究气液固电催化反应的表征新方法；探究气液固界面电催化反应在不受传质影响条件下的本征反应动力学，建立科学的液-固、气-液-固界面电催化本征活性评价方法。

## 7.3 工况条件下电催化活泼中间体检测

针对电催化过程中有机中间体寿命短且难以检测的问题，发展可靠表征技术，明确中间体状态，解析反应机理。在工况条件下结合快扫X射线吸收谱、电子顺磁共振谱、红外光谱等多谱学手段与理论计算，建立适用于有机溶剂体系和水溶液体系的电催化原位表征方法；通过获取电催化反应活泼中间体结构信息，揭示碳及杂原子自由基、有机金属活性中间体等的生成与转化机制，指导实现新型电催化体系的

设计与精确调控。

#### **7.4 涉及自由基中间体催化反应的精准控制新原理、新方法**

涉及自由基中间体催化反应的精准控制是催化合成中最前沿性和挑战性的转化过程。针对在自由基中心上精准构建化学键这类重要的基元反应中立体选择性控制的科学难题，采用自由基中间体转换以及催化中心周围弱相互作用环境的构筑等策略，研究催化过程中的配体加速、配体减速效应以及金属中心的电子调控规律，实现化学键构筑的高选择性。

#### **7.5 精准催化合成环境友好高分子研究**

基于催化活性聚合的基本原理，探索精准合成环境友好高分子的新催化体系，合成高性能聚合物。利用协同效应、不对称效应等重要反应机理，创制高活性高选择性催化体系，揭示高性能催化聚合原理；开辟由多种单体出发精准控制聚合物序列的新方法，建立结构新颖的嵌段共聚物；基于精准序列高分子的性能建立构效关系，明确催化体系-聚合物序列-材料性能的内联联系，为催化合成高性能环境友好高分子提供新思路。

#### **7.6 超分子催化新方法与新概念**

采用协同利用多种、多重非共价作用等创新方法，调节反应中间体和瞬态物种的活性及稳定性，以提高现有重要化

学反应的效率与选择性；发明高效超分子催化新方法，实现温和条件下化学键的精准断裂和重组；在相关方法研究的基础上提出超分子催化的新概念，拓展对该领域基本理论的认识。

### **7.7 表面等离子激元催化**

发展结构可控的表面等离子激元催化剂，认识纳米结构与光子相互作用的本质，探索电磁场热点的光热和光电协同催化机理；利用时空分辨等先进表征技术，揭示局域光场、电场、电荷富集和催化活性位点之间的内在联系以及等离子激元的动态驰豫机制，提出电荷分离新策略，聚焦重要等离子基元诱导的催化反应,实现高效等离子激元催化体系理性设计。

### **7.8 基于动态谱学大数据的多功能催化及精准调控**

发展大科学装置的快速X射线谱学与红外谱学等的联用方法，研究CO<sub>x</sub>加氢制高值含氧化合物新过程中氧化物基多功能催化剂上的复杂反应网络及精准调控；发展人工智能和分子动力学模拟方法，解析联用谱学大数据，推演并预测动态活性结构及气氛诱导的局域微环境变化；结合多组分稳态同位素瞬变动力学，关联活性中心-表面物种-反应动力学的动态依赖关系，探索原创性的多功能催化设计新理论及新研究方法。

### **7.9 工况条件下表面催化反应振荡行为的动态表征与理论模拟**

结合运用近常压原位动态表征技术与理论模拟手段，在工况条件下研究表面催化反应振荡行为与催化性能的动态关系，厘清反应条件下催化剂的活性状态，探索新的催化理论。结合动态理论模拟手段，从时间与空间角度探究振荡行为的原子尺度本质及其与反应转化率、选择性及催化剂稳定性之间的联系。

### **7.10 基于热光催化转化的聚合物降解机制与催化体系构建**

构建均匀分散于聚合物结构内的热光催化转化体系，实现高效热致发光；建立热光催化转化分散体系的熵增模型，构建高效稳定的催化体系；建立聚合物热能降解老化定量评价方法，明确聚合物在不同维度的热能降解程度和不同热光催化体系对降解热力学及动力学的影响规律。

### **7.11 面向纳米催化剂工程化的固定-流化床设计与构建**

设计多孔载体包覆纳米催化剂的中空结构，即纳米催化剂以游离状态存在于具有大尺寸中空结构的多孔载体内部，反应物和产物可经由载体多孔壁自由进出，而纳米催化剂限制在中空结构内，避免流失、且易于回收；设计并构建新型固定-流化床，建立此类多相催化反应体系的宏观动力学模型，并明确特殊的反应床层结构与本征反应动力学、扩散动力学及热量传递的定量规律；探索中空结构微反应区域内纳米催化剂的构效关系，并通过空间限域作用强化催化反应动力学，

实现纳米催化体系的长周期运行。

### **7.12 光电催化体系的界面精准调控与微观机制**

围绕太阳能光电催化中的界面电荷转移和表界面催化反应的动力学问题，研发高效捕光的光电催化材料及其可控制备方法与理论，研究光电催化材料内建电场及界面工程在光生电荷管理方面的作用与机制；发展光电催化体系促进固液界面电荷转移的策略，阐明界面电荷转移微观机制及光生电荷参与表界面催化反应动力学过程；构建太阳能自驱动器件或装置，通过光电催化分解水一步制取高纯氢、双氧水或重要化学品。

### **7.13 生物质平台分子的高效催化转化**

针对生物质平台分子高效转化的关键科学问题，研制高活性和高选择性的催化剂和催化体系，实现生物质平台分子，如氨基酸、糖和芳香化合物等的高效催化转化，完成生物质平台分子中官能团的迁移、转化和立体结构调整，合成在药物化学和生命科学中具有重要价值的有机小分子。

### **7.14 纳米孔催化剂失活机制研究新方法与新概念**

针对催化剂的失活问题，开创高分辨纳米孔限域催化剂失活机制研究新方法和新概念。建立纳米孔催化剂的精准构筑方法和理论，发展原位TEM表征新技术和新方法，在线研究反应过程催化剂结构演变，解析催化剂活性中心在孔道、界面等限域空间的失活新机制；提出纳米孔催化剂抗失活新

理论和新方法，建立多物理场驱动（热、电、磁等）下纳米孔限域催化剂性能、寿命提升新方法，创制新型高活性、高选择性、高稳定性、长寿命催化剂；基于相关研究方法提出纳米孔限域催化的新概念，扩充对该领域基本理论认知的支撑。