

# “催化科学”重点专项 2024 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。

2024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12个项目。同时，拟支持5个青年科学家项目。

指南方向7是青年科学家项目，支持青年科研人员承担国家科研任务。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 催化的电子自旋调控

**研究内容：**针对涉及自旋的化学反应存在电子自旋作用机制不明、调控困难的问题，提出并建立电子自旋调控催化活性/选择性的新理论和新策略；通过晶体场、配位/分子场、内/外磁场等手段调控涉氧反应、铁催化碳碳成键、活性氧转化等催化反应的电子自旋态，

阐明电子自旋调控反应的机制，实现反应速率/选择性的提升；构建催化反应活性和选择性调控的自旋维度，解析化学反应中电子自旋结构的时空演化，阐明高效稳定的化学键转化本质，为绿色能源、绿色合成化学、分子诊疗提供新思路、新方法和新技术。

**考核指标：**发展 3-5 种自旋响应的涉氧、铁催化碳碳成键、磁场响应（0-1T）的氧活化新反应（体系）；针对 3 类涉及电子自旋的化学反应，明晰自旋结构与反应速率、选择性和稳定性的构效关系，建立自旋与催化性能之间的多尺度物理模型，提出电子自旋调控催化新理论；设计 3-5 种电子自旋调控的涉氧反应非贵金属催化剂、碳碳成键铁催化剂和仿酶光敏剂。

## 1.2 铁电催化转化体系研究

**研究内容：**针对铁电催化转化新领域，构建铁电催化新体系，实现多元化能源利用和高环境适应性的长效化学催化转化过程。通过分子设计铁电畴微结构，阐明铁电畴壁为催化活性中心的机制；利用铁电极化作用实现催化微环境的动态调控，揭示铁电畴和铁电极化与催化活性和选择性的内在联系。发展铁电催化原位表征技术和定量描述方法，研究多场耦合环境下的铁电催化转化原理，开辟铁电催化新方向。

**考核指标：**建立基于铁电畴和铁电极化的催化转化新概念和新理论，实现基于铁电催化过程的高效制氢（催化剂稳定运行>1000 小时）、高选择性 CO<sub>2</sub> 还原（产物选择性>90%，机械能制化学品

效率>30%)、常温常压  $\text{N}_2$  转化、不对称反应和高附加值有机合成等反应。

### 1.3 温和条件下模拟酶高效固氮

**研究内容：**针对传统合成氨高能耗的问题，开展接近常压常温条件下制氨、硝酸盐含氮化学品、含氮有机化合物等研究。师法生物固氮酶的结构及催化原理，结合机器学习，创制适用于热、光、电、等离子体等多场耦合的新型模拟固氮酶催化剂，实现超越现有催化体系的高效固氮；发展高时空分辨的原位表征技术，探究热及光、电外场作用下氮氮三键的活化、断裂与转化机制，在原子和分子尺度获得高活性中间体的动态演化规律；设计多相流动反应器件，建立模拟酶高效固氮新体系，提升固氮效率、选择性和稳定性，探索温和条件下规模化固氮的可行性示范。

**考核指标：**开发 4-5 种模拟固氮酶催化剂，发展 2-3 种温和条件下化学固氮新体系的构筑方法与集成器件，创新 1-2 种针对该过程的高时/空分辨原位表征方法；实现制氨、硝酸盐等含氮化学品的产物选择性>96%、转化速率>1200 mmol/g 催化剂/h、稳定运行超过 100 小时（效率衰减<20%）。

## 2. 催化剂创制

### 2.1 面向非贵金属催化体系的新型载体材料

**研究内容：**针对贵金属储量稀少、价格昂贵的挑战，发展新型非贵金属多相催化体系，实现温和条件下小分子的高效资源化转化。

发展非常规催化剂载体的制备新方法，突破传统载体材料在重要催化反应中的性能极限和功能制约，用于稳定高温、高压等严苛反应环境中高负载量的高性能非贵金属催化剂；发展机器学习赋能的智能化催化剂制备与性能评价系统，筛选对碳氢、碳氧、氮氮等化学键转化具有高催化性能的非贵金属催化剂，揭示非贵金属多相催化剂活性、稳定性与选择性的调控规律；发展非贵金属多相催化材料的宏量制备方法，开发具有实际应用价值的精细化学品绿色催化合成工艺。

**考核指标：**建立高比表面积（ $>100\text{ m}^2/\text{g}$ ）和高纯度（95 wt%）碳化物、氮化物、硼化物等非常规催化剂载体的宏量合成方法，载体导电、导热和耐腐蚀能力显著优于当前工业应用的炭黑、氧化铝、氧化硅等传统载体材料；开发出一套机器学习赋能的自动化智能化催化剂制备与催化性能评价系统，在原子和分子尺度上揭示非贵金属位点的动态演变机制和催化作用机制；开发可用于碳氧键胺化、加氢等还原反应的非贵金属催化剂，目标产物收率达到 95%以上，催化剂寿命 $>1000$  小时，实现至少两种高附加值精细化学品绿色合成的工业示范应用。

### 3. 催化原位动态表征与模拟

#### 3.1 微界面催化过程尺度效应的智能化模拟

**研究内容：**针对微界面（固-液、气-液和气-固-液）催化过程的尺度效应，发展数据驱动的机器学习技术和动力学模拟方法，建立

大数据-机器学习-计算模拟互动的自由能途径探究新范式；发展微米尺度界面构筑数值模拟方法，揭示微界面层结构、组成和表面状态等与催化性能的内在关系；实现代表性体系（如微液滴和微球）微界面光、热催化过程全原子、智能化的动力学模拟；应用微界面化学物理过程原位表征技术，探测微界面光、热催化反应的机理以及相关的活性中间体和产物。

**考核指标：**在建立微界面光、热催化过程模拟范式和代表性体系全原子动力学模拟的基础上，创制微界面光、热催化过程自由能计算和智能化模拟软件，主要包含微界面催化反应的绝热和非绝热动力学模拟、微界面结构和化学组分设计以及催化活性评估等程序模块；建设微界面成分、结构、光热催化反应数据集一套；理论模拟和实验表征双向互动，阐明 3-5 个代表性微界面光、热催化反应的尺度效应和内在机理，发现其中蕴藏的新规律。

## 4. 可再生能源转化与存储的催化科学

### 4.1 面向重要工业过程的光化学合成

**研究内容：**针对光化学合成过程中反应效率低、选择性差的瓶颈，发展新型调控策略和反应体系，实现高原子经济和选择性可控的光化学有机合成，研究光化学反应活性及选择性调控的新方法，获取高活性中间体生成和转化的热力学和动力学图像，建立光化学有机合成新理论，发展自动化连续反应装置和规模化工艺路线，实现药物和材料单体等有机化学品的高效光化学精准合成及示范性应

用。

**考核指标：**发展 5 类以上可用于烯烃、烷烃官能团化的新型光催化剂及光化学合成反应体系，实现硼化、硅化、胺化、羧基化、烷基化等具有重要工业应用价值的合成反应，催化活性不低于 0.1 mol%；开发 3 个以上药物或有机材料的创新生产工艺，实现氨基硼酸等关键药物中间体和己二酸、邻苯二甲酸酐等材料单体的制备，完成百公斤级示范，产品纯度>99%。

#### 4.2 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碳氧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及动力学，建立催化全过程模拟仿真模型；明确钙、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℃ 以上，CO<sub>2</sub> 直接排放减少 95% 以上，自催化产生的 CO 选择性大于 95%。

### 5. 化石资源转化的催化科学

#### 5.1 流态化催化氨氧化过程机制及高端腈类化学品合成

**研究内容：**围绕烯烃、芳烃氨氧化流化床催化过程，阐明催化

剂表界面微环境和气固传递介观强化机制及调控策略，建立流态化氨氧化多功能协同催化机制、多尺度传递及反应动力学模型；创制异丁烯氨氧化制甲基丙烯腈、氯代甲苯气相氨氧化制氯代苯甲腈高选择性催化剂；设计高效流化床反应器，开发系列烃类高效催化氨氧化生产腈类高端化学品成套工艺技术。

**考核指标：**创制高负荷、高收率异丁烯氨氧化制甲基丙烯腈流化床催化剂，异丁烯摩尔转化率 $>98\%$ ，甲基丙烯腈摩尔收率 $>77\%$ ，异丁烯质量空速 $>0.09\text{ h}^{-1}$ ；创制系列高收率氯代甲苯气相氨氧化制氯代苯甲腈催化剂，氯代甲苯摩尔转化率 $\geq 99\%$ ，氯代苯甲腈摩尔收率 $\geq 81\%$ ；完成催化剂吨级放大，平均粒径  $45\text{-}60\text{ }\mu\text{m}$ ，磨损率 $<4\%$ ；开发高负荷流化床氨氧化反应器及工艺，完成工艺包设计和千吨级工业试验。

## 5.2 面向烃转化的催化膜创制及膜反应器应用

**研究内容：**针对烃类转化、烯烃环氧化等重要反应体系，研制高效催化膜材料及膜反应器。研究膜通道环境内催化活性位点的精准构筑方法，探索膜微结构对催化材料稳定性的影响规律，探究催化性能与膜分离性能的匹配关系，建立催化活性和分离性能的协同调控策略；创制膜反应器，研究催化过程与膜过程相互影响及耦合机制，开发膜反应器强化技术，开展膜反应器在典型反应体系中的应用研究。

**考核指标：**创制 2 种以上催化膜材料；开发出异丁烷正构化膜催化反应器，催化膜面积  $10\text{ m}^2$  以上，丁烷处理量达到  $100\text{ kg/日}$ ，

正丁烷产品纯度 98%以上，膜反应器转化率比平衡转化率提高 15%以上；开发出石脑油异构化膜催化反应器，较现有反应-精馏过程节能 30%，完成 1000 小时的稳定运行评价；完成膜反应器应用于万吨级环氧丙烷生产的技术经济性评价。

### 5.3 煤基乙炔电催化制乙烯

**研究内容：**开展常温常压下“零碳排放”的煤基乙炔电催化制乙烯研究。开发高效非贵金属基电极材料和电催化体系，实现以水为氢源的乙炔高效制乙烯过程；揭示催化剂结构与反应活性和选择性的构效关系，探索界面微环境影响三相界面物理传质、水结构与化学转化过程的微观动力学规律，明确水中氢的转移机制；开发乙炔直接加氢电解装置，实现在工业级电流密度下乙烯的高法拉第效率和高选择性电合成，完成大电流密度工况下的稳定性和能耗测试。

**考核指标：**开发 2-3 种非贵金属基高效电催化剂；建立催化结构和界面微环境调控反应活性及选择性的新原理和新机制，创制乙炔选择性半氢化的描述符；实现在 $\geq 300 \text{ mA cm}^{-2}$ 的电流密度下乙炔制乙烯的法拉第效率 $\geq 95\%$ ，选择性 $\geq 99\%$ ；实现 25 kW 工业电堆验证，稳定运行超过 500 小时。

## 6. 环境友好与碳循环的催化科学

### 6.1 润滑基础油催化合成的新途径

**研究内容：**基于催化剂源头创新，发展从乙烯直接聚合/煤炭制备合成基础油的新途径；阐明催化剂对高分子链支化形式、支链结



构的影响；探索新型基础油的分子结构-性能-使用性能（添加剂及配方）的关联，为发展高品质基础油技术及其在高端润滑油中的应用奠定科学基础。

**考核指标：**设计合成 25-30 个催化剂，发展 3-5 个高活性合成新型基础油催化剂体系并实现催化剂公斤级制备；乙烯聚合活性  $> 13000 \text{ g 油/g 催化剂}$ ，利用率  $> 95\%$ ；费托蜡转化率  $> 70\%$ ，选择性  $> 85\%$ ；研制至少 3 个牌号高品质全合成润滑基础油，黏度指数、氧化安定性和蒸发损失等指标超过相同粘度的进口产品；发展新型全合成基础油的成套制备技术，实现至少 2 个牌号的新型乙烯基全合成基础油技术的千吨级生产示范。

## 6.2 饱和芳烃分子氧绿色氧化过程

**研究内容：**围绕以甲苯为代表的典型饱和芳烃化合物通过分子氧氧化获取高值化学品的绿色过程，阐明饱和芳烃化合物和分子氧选择性活化和多步转化协同的反应规律；在纳米尺度上发展组成与原子数目精确可调的金属或化合物活性中心及其配位微环境，并在更大尺度上组装构建高效和高选择性催化体系；针对甲苯与分子氧绿色氧化过程，结合全过程模拟与设计，掌握由小到大组装催化剂的作用机制与协同传质控制规律；建立连续流动条件下的反应、分离一体化技术流程，实现目标产物苯甲醛高效高选择性规模化制备。

**考核指标：**实现连续流动条件下甲苯氧化单程转化率  $> 80\%$ 、苯甲醛选择性  $> 99\%$ 、寿命  $> 1000$  小时；掌握饱和芳烃碳氢键断裂、分子氧活化控制、碳氧键形成等规律，阐述催化剂构效关系与催化

作用机制；获得 5 种以上高效高选择性催化材料，建立 1-2 套催化剂放大制备方法，至少 1 项在千吨级装置上获得验证及应用。

## 7. 青年科学家项目

### 7.1 聚合物催化降解新途径

针对聚对苯甲酸二乙酯（PET）、聚乳酸（PLA）、聚氯乙烯（PVC）、聚苯乙烯（PS）、聚乙烯（PE）、聚丙烯（PP）等废塑料及其混合物定向催化转化制备羧酸、酯、醇、芳烃、胺、腈等化学品，开发新的反应路线，设计制备单一金属和多金属催化剂；研究反应路径及反应网络，确定反应的关键步骤；研究催化剂组成、结构与性能的关系，以及催化剂各组分间的协同作用规律，探索碳氧、碳碳、碳氯、碳氢等化学键的活化以及碳氮键形成规律和催化反应机理。

### 7.2 光酶催化有机合成

利用天然光敏蛋白或人工光敏蛋白，发展光酶催化非天然反应，实现资源小分子活化转化合成高值化学品，通过高时空分辨谱学技术，结合理论计算，研究光、酶、底物之间的相互作用，揭示反应机制，掌握高活性中间体的产生和转化的调控规律，建立光酶催化有机合成的新策略与新理论，开发基于光酶催化的有机合成新范式。

### 7.3 绿色催化氧化新反应

针对在醛、酮、酸等精细化学品生产中大量使用氧化剂造成的严重环境污染问题，利用电、光等外场条件下的连续单电子转移特点，

实现绿色氧化新反应。发展易得醇、胺和酮等原料的新活化模式，探索电化学或者光电协同催化条件的选择性官能化转化，为精细化学品的高效高选择性合成提供新路径；基于电化学或者光电共催化的策略，发展新的催化体系，探索基于芳(杂)环烃的高效高选择性新反应，为烃类分子高值化提供新方法，为一些药物中间体的简洁合成提供科学与技术支撑。

#### 7.4 自旋选择性加氢多相催化剂的创制

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。

#### 7.5 模拟光合作用关键结构的组装催化体系

模拟色素体和藻胆体等光合作用关键结构，发展环境友好的水相无机、有机、或配位超分子自组装光催化体系。通过组装体内捕光阵列与催化中心的高效耦合，揭示自组装光催化体系的天线效应、微环境效应及其协同催化机制。利用同步辐射等高时空分辨技术探究组装体结构及催化中间体演化过程。探索可见光驱动的高量子产率的有机合成新反应，特别是低浓度下  $\text{O}_2/\text{CO}_2$  常温常压转化及其与不同小分子的高效耦合反应，发展组装模拟体系的催化转化新体系。