



科学与技术前沿论坛 (第132次)

介催化科学与技术前沿 会议手册

主办单位：中国科学院学部

中国·北京

2022年11月1日





中国科学院学部“科学与技术前沿论坛”
——介催化科学与技术前沿

会议手册

主办单位：中国科学院学部

承办单位：中国科学院化学部

中国科学院学部学术与出版工作委员会

协办单位：中国石化上海石油化工研究院

《中国科学》杂志社

中国·北京

2022年11月1日



目 录

会议简介	1
目的与意义.....	2
论坛日程	4
参会代表名单	6
摘要文集	9
论坛须知	53



论坛简介

为将中国科学院学部建设成为创新思想活跃、学术作风严谨的我国科学技术方面的最高学术机构，切实发挥学部的学术引领作用，并为决策咨询工作提供科学技术支撑，2011年3月25日，中国科学院学部主席团六届十次会议决定开展“科学与技术前沿论坛”（简称“论坛”）活动。

论坛活动是中国科学院学部主席团统一领导下、各学部常委会和学部学术与出版工作委员会等共同承办的高层次学术活动，着眼于科学技术前沿探索、系统评述和前瞻预测。

论坛旨在推动前沿科学理论和技术探索，促进学科发展战略研究系统深入开展，促进学科交叉融合及国际学术交流，发现和培养优秀人才，倡导科学民主，鼓励学术争鸣，充分发挥学部对我国科学技术前沿和未来创新发展的引领作用。

论坛特邀若干报告人做主题报告，鼓励与会院士、专家围绕主题进行自由讨论，一般向社会开放。特邀的报告人一般为科研一线的优秀科学家，重视邀请国外专家和优秀青年学者。报告人应提交符合《中国科学》、《科学通报》（简称“两刊”）出版要求的论文，论坛论文和综述稿以“两刊”专栏或专辑、年度论坛报告集等方式公开出版。

科学探索无止境，百家争鸣创新篇。中国科学院学部愿为中青年科技专家提供展示才华的“舞台”，共同促进学术繁荣，为促进我国科技发展和服务国家发展战略做出应有的贡献。



目的与意义

21 世纪以来, 纳米尺度及原子尺度的催化科学取得了显著进步, 对描述催化剂活性中心、单原子结构及其催化作用机制形成较精准的理论方法, 促进了新催化材料的创制; 另一方面, 基于宏观和微观的多尺度动力学与反应器模拟方法研究也取得积极进展, 推动催化和反应工程技术的创新和进步, 为化学工业可持续发展奠定了基础。然而, 目前对微观尺度 (纳米) 与宏观尺度 (米) 之间的介尺度的催化过程的认识仍需进一步明晰, 介催化理论与技术的研究已成为催化与反应工程领域的重要方向。

目前的介尺度认识更多聚焦于工程科学和材料科学, 但由于介催化机制更加复杂, 相关理论和方法研究面临较大挑战。在工业催化过程中, 如石油炼制和石油化工中催化裂化、馏分油加氢、甲苯歧化等过程所采用的催化剂级配装填、分区反应技术等, 其中蕴涵以宏观的工程方案调控介催化的思想。深入研讨介催化理论和方法, 建立介催化材料与匹配的反应工程关联, 促进工业催化过程向高效、原子经济的新过程新产品发展意义重大。在学科发展层面, 介催化可归纳为三个重要方向: (1) 介催化材料的结构及机制, 其特点是催化活性中心的空间非均匀分布与介催化效应; (2) 反应过程的介催化效应, 其特点是介催化的能量匹配性、方向性、时序性, 涉及反应与扩散耦合以及反应之间的耦合机制; (3) 对介催化过程的动态的认识, 包括主体与客体各自的变化及二者变化的互动。

开展介催化研究可以为催化理论和应用提供崭新的创新空间, 为系统深入认识催化材料结构特征、催化作用机制、催化化学与反应工程理论和方法融合提供有效方法和依据。但是介催化的概念及其内涵需要深化, 如活性位组装的机制; 催化活性位的空间不均匀性、介催



化的相互作用和传输效应；介催化与纳米催化、双功能催化等概念关联；多级孔分子筛的反应-扩散耦合机制定量描述与精准控制；描述催化活性中心量子力学与微环境分子力学结合的介催化理论模拟方法等。

“介催化科学与技术前沿”论坛，其目的是以催化科学与产业前沿为视角，组织相关学科领域专家学者研讨介催化的新概念、新方法和新实践，凝练介催化的关键科学问题及内涵，建立介催化材料的组装与反应机制、介催化表征及模拟计算、介催化与反应工程融合等催化研究新认识和新方法，提出若干基于介催化的新反应途径重要课题方向。通过学科交叉与产业结合，为解决催化科学前沿问题和工业催化工程技术难题提供新方案，提升传统化工技术、开辟催化新反应过程、开发高端化学新产品，支撑引领能源化工迈向可持续发展的新阶段。



论坛日程

11月1日上午		
开幕致辞与主旨报告 主持人：苏宝连		
时间	报告人	报告主题
8:30-8:45	致辞：何鸣元、陈懿、李静海	
8:45-9:05	谢在库	探索介催化：从理念到实践
议题1 介催化相关新理念 主持人：李灿		
9:05-9:25	丁维平	介观催化研究的构想与探索
9:25-9:40	骆广生	多相微流动与催化转化
9:40-9:55	黄文来	多相催化系统介尺度建模
9:55-10:10	王 野	接力催化及其在 C1 化学中的应用
10:10-10:25	郑安民	分子筛催化的计算模拟
10:25-10:45	点评、讨论	
10:45-11:00	茶歇/参会代表合影	
议题2 介催化材料的结构及机制 主持人：杨为民		
11:00-11:20	张 涛	多相金属催化：从纳米到原子
11:20-11:35	肖丰收	“分子围栏”催化材料
11:35-11:50	李兰冬	分子筛限域金属催化材料
11:50-12:05	吴 鹏	新型杂原子分子筛材料
12:05-12:25	点评、讨论	
午餐、休息		



论坛日程

11月1日下午

议题3 多相催化反应过程的介催化效应 主持人：韩布兴

14:00-14:20	刘中民	甲醇制烯烃过程分子筛层次催化剂积炭介尺度结构与机制研究进展
14:20-14:35	李明丰	石油炼制催化加氢过程介催化问题探讨
14:35-14:50	葛蔚	催化反应与扩散传质耦合的介尺度模拟
14:50-15:05	陈丽华	等级孔分子筛催化材料
15:05-15:20	徐君	分子筛催化的固体核磁共振研究
15:20-15:35	钟良枢	合成气转化直接制高值化学品选择性调控
15:35-15:50	朱海波	介尺度调控机制下高性能丙烷脱氢催化剂的创制
15:50-16:10	点评、讨论	
16:10-16:25	茶歇	

议题4 电催化反应过程的介催化效应 主持人：田中群

16:25-16:45	孙世刚	车用燃料电池非贵金属催化剂及介催化过程研究
16:45-17:00	庄林	碱性聚合物电解质催化体系
17:00-17:15	魏子栋	燃料电池催化剂
17:15-17:30	汪国雄	二氧化碳电催化还原
17:30-17:50	点评、讨论	

论坛总结 主持人：谢在库

17:50-18:10	苏宝连	论坛总结
-------------	-----	------

晚餐



参会代表名单

论坛执行主席			
序号	姓名	单 位	职称
1	谢在库	中国石油化工股份有限公司	教授级高工
2	苏宝连	武汉理工大学	教授

论坛顾问			
序号	姓名	单 位	职称
3	何鸣元	中国石化石油化工科学研究院	教授
4	陈 懿	南京大学	教授
5	李静海	中科院过程工程研究所	研究员

报告主持人及报告人			
序号	姓名	单 位	职称
6	李 灿	中科院大连化学物理研究所	研究员
7	段 雪	北京化工大学	教授
8	赵东元	复旦大学	教授
9	包信和	中科院大连化学物理研究所	研究员
10	田 禾	华东理工大学	教授
11	张 涛	中国科学院	研究员
12	丁奎岭	中科院上海有机化学研究所	研究员
13	韩布兴	中科院化学研究所	研究员
14	张锁江	中科院过程工程研究所	研究员
15	刘中民	中科院大连化学物理研究所	研究员
16	田中群	厦门大学	教授



参会代表名单

17	孙世刚	厦门大学	教授
18	陈 军	南开大学	教授
19	徐春明	中国石油大学（北京）	教授
20	杨为民	中国石化上海石油化工研究院	教授级高工
21	丁维平	南京大学	教授
22	骆广生	清华大学	教授
23	黄文来	中科院过程工程研究所	副研究员
24	王 野	厦门大学	教授
25	郑安民	中科院精密测量科学与技术创新研究院	研究员
26	肖丰收	浙江大学	教授
27	李兰冬	南开大学	教授
28	吴 鹏	华东师范大学	教授
29	李明丰	中国石化石油化工科学研究院	教授级高工
30	葛 蔚	中科院过程工程研究所	研究员
31	陈丽华	武汉理工大学	教授
32	邓 风	中科院精密测量科学与技术创新研究院	研究员
33	徐 君	中科院精密测量科学与技术创新研究院	研究员
34	孙子罕	中科院上海高等研究院	研究员
35	钟良枢	中科院上海高等研究院	研究员
36	朱海波	福州大学	教授
37	庄 林	武汉大学	教授
38	魏子栋	重庆大学	教授
39	汪国雄	中科院大连化学物理研究所	研究员





科学与技术前沿论坛
介催化科学与技术前沿
摘要文集

中国·北京

2022年11月1日





目 录

介观催化研究的构想与探索	12
多相微流动与催化转化	14
多相催化系统介尺度建模	16
接力催化及其在 C1 化学中的应用	18
分子筛催化的计算模拟	20
多相金属催化：从纳米到原子	22
“分子围栏”催化材料	24
分子筛限域金属催化材料	26
新型杂原子分子筛材料	28
甲醇制烯烃过程分子筛层次催化剂积炭介尺度结构与机制研究进展	30
石油炼制催化加氢过程介催化问题探讨	33
催化反应与扩散传质耦合的介尺度模拟	35
等级孔分子筛催化材料	37
分子筛催化的固体核磁共振研究	39
合成气转化直接制高值化学品选择性调控	41
介尺度调控机制下高性能丙烷脱氢催化剂的创制	43
车用燃料电池非贵金属催化剂及介催化过程研究	45
碱性聚合物电解质催化体系	47
燃料电池催化剂	49
二氧化碳电催化还原	51

介观催化研究的构想与探索

丁维平

介观化学教育部重点实验室，南京大学化学化工学院

介观催化属于介观科学和技术的范畴，要旨在于利用协同与复杂性实现非凡催化技术。与纳米催化在被引起广泛重视之前早已存在一样，介观催化现象实际上也一直广泛地存在于人工和自然界的催化体系之中。在传统多相催化及纳米催化研究取得巨大进展的基础上，有意识地、深入和系统地探索介观催化作用，研究其特色，掌握其作用规律，是富有研究范式创新意义的重要工作，可望得到结构全新、性能卓越的介观催化剂，在碳达峰与碳中和的国家导向、环境保护与安全生产要求下，在化学化工制造与新能源应用领域中引领下一代催化技术的重大创新和突破。

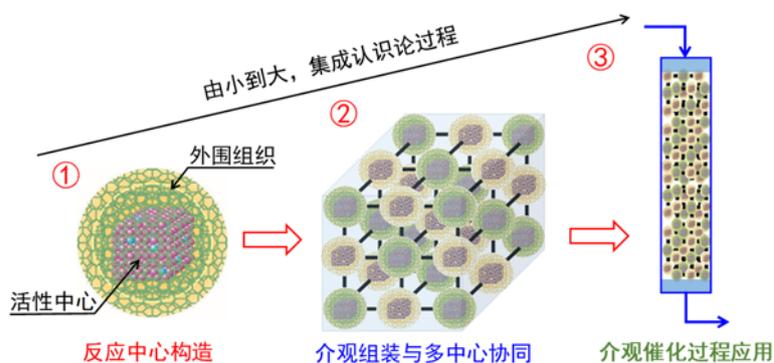


图 1. 介观催化剂构造与介观催化过程应用

如图 1 所示，介观催化研究在尺度上可分为三个层次，①针对传统意义上所认识的催化活性中心，根据反应需求，为其构造一个外围组织，在构造中更多地考虑内部的电子运动，使得活性中心局部形成更加完整的三维作用势场，创造对反应分子化学键进行操作、具有非凡催化功能的反应中心；②利用外围组织的识别与组装作用，将上述同种或不同种反应中心在更大的尺度上组成结构有序的组装体，考虑在反应中心之间的反应分子运动，利用反应耦合与串联，实现高效的

创新反应过程；③结合催化剂成型技术，如造粒、挤条以及模铸和 3D 打印等，制造催化反应构件，在质、能传送上与反应器配合，最终构成实用的高端催化技术。研究中需要把握构成单元的性质与组装规律，如活性中心和其外围组织的多重相互作用及其对反应物、产物分子的质能传递机制和规律，界面、缺陷、非稳态结构、多反应中心间协同作用的规律，发展能够处理跨时空尺度的制备方法、表征技术和理论体系。

本报告回顾过去十年中，我们遵循如上所阐述的介观催化研究思想，在金属团簇催化研究（精确阐明催化反应中心作用）、碳基介观材料制备（组装）、苯甲醛制造（氧化反应）、对氨基苯酚生产（还原耦合反应）、芳香氨生产（跨尺度高效反应）、 CO_2 加氢制乙醇（组合加氢）、 CO_2 、硝酸根还原（耦合电催化）、低铂燃料电池催化剂（反应中心电子作用传递）、液体燃料电池新技术（组合器件）、3D 打印整体催化构件等方面所进行的构想与探索工作。



丁维平，在南京大学化学系获得学士、博士学位。曾先后在南京大学物理系、美国加州大学伯克利分校化工系、美国哈佛大学化学系访问学习与从事研究工作。现任南京大学化学化工学院教授，介观化学教育部重点实验室主任。近年来，探索“介观催化”研究，在选择加氢、选择氧化、整体酸催化、燃料电池催化剂以及电催化等方面获得较丰硕的创新成果，并攻坚克难，身体力行向产业化应用转移。



多相微流动与催化转化

骆广生

清华大学化工系，化学工程联合国家重点实验室

二十世纪九十年代以来，自然科学与工程技术发展的重要趋势是向微型化迈进。微型化工设备具有结构简单、无放大效应、操作条件易于控制和内在安全等优点，世界著名高等学府以及跨国化工公司如 MIT、Dupont、Merck 和 BASF 等纷纷开展这方面的研究工作。基于设备微型化的思想，国际上逐渐形成微化工技术这一化工学科前沿方向，它涉及物理、化学、化工、生物、材料、微电子以及微机械加工等诸多领域，学科交叉综合性强，充分体现了现代学科发展的特点。由于微化工技术较常规大型化工装备体现出了许多优异性能，如快速混合、传热传质性能优异、均一的反应环境、反应条件可控、反应选择性高和效率高、以及可基于微反应器数量进行放大等，这一技术也被中国工程院评选为全球工程前沿技术，是化工产业发展的制高点之一。微尺度多相流动、传递与反应特性为实现催化过程强化提供了重要的基础，对于传递过程控制的催化转化过程，通过微型化技术可通过多相微分散方法来大幅度提高多相传递性能，进而有效提升催化转化的效率和选择性。其介尺度核心科学问题是微分散尺寸调控和多相界面行为，以及相间传递与催化转化的耦合规律，即调控微分散过程作用力机制、微分散尺寸大小以及多相界面面积，调控相间传递与反应的耦合机制等。本报告将重点围绕微尺度分散机制调控、多相界面动态行为、以及非均相催化转化过程强化等几个方面分析探讨介尺度催化转化机制，同时对于微化工技术在催化转化方面的未来发展也将进行一个简短的展望。



骆广生，工学博士、清华大学教授、化学工程联合国家重点实验室主任、长江学者特聘教授、国家杰出青年科学基金获得者。作为清华微化工方向创始人，长期从事微化工科学与技术研究，发表 SCI 收录论文 450 余篇，获授权发明专利 100 余项，出版专著 1 部、译著 1 部、教材 2 本、手册以及著作章节 13 篇，部分成果入选化工类教材和手册以及科普读物，以第一完成人获国家技术发明二等奖和科技进步二等奖各 1 项以及省部级奖励 10 项。提出了“尺度和界面效应”是微化工技术核心的论断，系统构建以微尺度流动与混合、分散、传递、反应以及微设备设计和放大为核心的微化工理论体系，创制了国际上公开报道的单台产能最大的微反应器，研发的微化工技术在 20 条生产线上成功应用，其中“食品级磷酸”和“溴化丁基橡胶”获工信部颁发的产品单项冠军称号。入选英国皇家化学会和中国化工学会会士、国际标准委员会微气泡分委会成员、国际微反应技术会议学术委员。任 CJChE 执行主编和多个学术期刊的编委。



多相催化系统介尺度建模

黄文来

中国科学院过程工程研究所，多相复杂系统国家重点实验室

广泛的多相催化系统至少涉及两个层次的介尺度复杂性：吸附层层次和活性位层次。吸附层层次侧重于表观催化反应动力学，其单元是单个吸附质，系统是二维催化剂表面上的整个吸附层，或三维催化剂孔道内的吸附质整体，介尺度结构就是反应过程中的吸附质分布。忽略这种结构，采用平均化处理所建立的系统尺度模型（反应-扩散方程），其结果与实际偏差较大；而从单元尺度出发描述这种结构对系统性能的影响，建立单元尺度模型，如微观主方程，由于考虑的冗余信息太多，一般难以用于实际时空规模的系统。因而，有效考虑介尺度结构，而不引入大量的冗余信息，就是介尺度建模的关键。基于介科学建模方法，分析吸附、脱附、扩散、反应等过程对吸附质分布的影响趋势，提炼出控制介尺度结构的主导机制，进而揭示介尺度结构的稳定性条件，即可构建出介尺度模型。对于给定的系统和操作条件，介尺度模型可用以高效、准确地获得系统的性能。对于给定的性能要求，也可用以反向优化操作条件或筛选、设计系统。该方法已应用于 $A-B$ 系统，并在 $A-B_2$ 、MTH 等系统中得到了初步验证。拓展到电催化，还应考虑离子电导、电子电导过程。拓展到光催化，还应考虑载流子的产生、分离与传输过程。描述这些输运过程也需要发展对应的介尺度模型，以便于催化稳态模型的动态化发展。

活性位层次侧重于本征催化反应动力学，其单元是单个电子、原子核，其系统是活性位所包含的全体电子、原子核，介尺度结构就是反应过程中电子、原子核的各种复杂分布。单元尺度模型（如 DFT）描述不同原子构型的电子结构，但由于计算量大，即使用以确定给定



系统的复杂催化反应路径也显得成本较高，更难用于系统筛选。系统尺度模型不考虑电子结构细节，基于势垒等系统量，分析反应路径的选择等系统行为，但经验性参数存在准确性、可移植性不足的问题，从单元尺度模型获得这些参数计算量大且不便于反向优化。因而，建立该层次的介尺度模型也显得尤为重要。文献中已有一些线索性认识，如果能够建立相应的介尺度模型，不仅便于分析给定活性位的性能，也可反向用于催化剂筛选或定制。

参考文献：

Huang W.L., Li J., *Chemical Engineering Science* 147: 83-90, 2016.

Sun F., Huang W.L., Li J., *Langmuir* 33: 11582-11589, 2017.

Huang W.L., Li J., Edwards P.P., *National Science Review* 5: 321-326, 2018.

Huang W.L., Li J., Liu Z., Zhou J., Ma C., Wen L.-X., *Chemical Engineering Science* 198: 253-259, 2019.

Huang W.L., Li J., Chen X., *Industrial & Engineering Chemistry Research* 58: 12478-12484, 2019.



黄文来，现任中国科学院过程工程研究所副研究员。2001年获清华大学硕士和博士学位；2001年至今，在中国科学院过程工程研究所工作；2009年10月至2010年4月在剑桥大学访问。

研究方向：介尺度建模，介科学

接力催化及其在 C1 化学中的应用

王 野

厦门大学

传统多相催化剂由活性相、载体和助剂构成。当前大多通过调控三者,如在亚纳米/纳米尺度设计构筑活性位,并通过助剂和载体修饰,以实现催化性能的调控。然而对于表面反应过程复杂、中间体与反应网络众多的复杂多相催化反应(如费托合成反应),通过传统多相催化剂的设计和调控往往难以精准控制反应过程。例如,包括费托合成在内的 C1 分子(CO、CO₂、CH₄、CH₃OH 等)涉 C-C 偶联制备含多个碳原子的液体燃料或高值化学品是 C1 化学的重要目标,但因表面反应中间体众多、反应网络复杂,导致产物选择性调控极具挑战性。报告人团队提出接力催化思路,引入在介尺度构筑多功能催化体系的理念,实现对反应过程的精准控制。即设计导向目标产物的特定中间体和反应通道,在介尺度组装适合各步骤的亚纳米/纳米活性相,构筑相互匹配的可控接力催化体系,实现目标产物的选择性合成(图 1)。

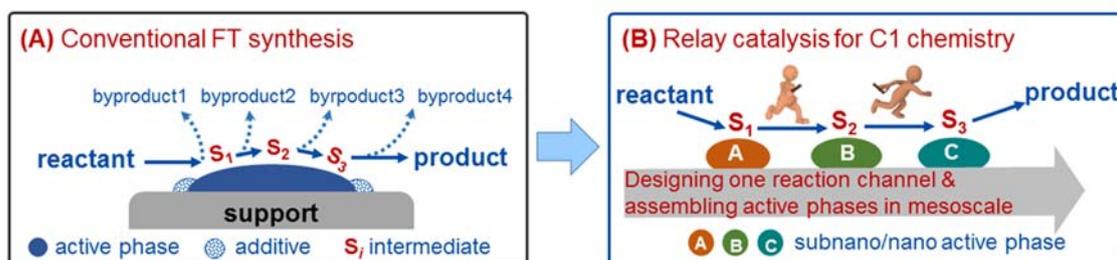


图 1. 接力催化提高复杂催化反应选择性示意图. (A) 传统多相催化过程. (B) 接力催化过程.

以合成气和 CO₂ 高选择性催化转化制高值 C₂₊产物为目标,报告人团队近年设计多条以甲醇等为中间体的接力催化路线,构筑多功能催化体系,成功发展出合成气高选择性制低碳烯烃、芳烃和 C₂ 含



氧化物(乙酸、乙醇)的新途径。接力催化各活性相间的热力学/动力学匹配性、活性相间距离效应及组分迁移等是决定接力催化体系性能的关键因素。近期，报告人团队关注中间体或产物的扩散和传输，致力于在介尺度组装各活性相，构筑核壳结构一体化多功能催化剂，实现中间体/产物单向输运，避免副产物生成，进一步提升了接力催化体系中合成气或 CO_2 催化转化的选择性。



王 野，厦门大学教授。1986 年南京大学本科毕业、1996 年东京工业大学博士毕业。1996-2001 年先后在日本东京工业大学、东北大学和广岛大学任教，曾任广岛大学副教授，2001 年 8 月起任厦门大学教授。2015-2022 年任固体表面物理化学国家重点实验室主任。主要研究方向为 C1 化学和能源催化。发表学术论文 270 余篇，获授权发明专利 40 余件。2006 年获国家杰出青年科学基金，2010 年获中国催化青年奖。担任 ACS Catal. 副主编等。



分子筛催化的计算模拟

郑安民

中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

分子筛是一类具有规则孔道结构的无机硅铝酸材料，其孔径一般在纳米量级，与纳米管类似也是一种非常典型的纳米限域反应器。限域在分子筛纳米孔道中的反应分子将会显现出与自由状态下明显不同的物理化学特性，同时限域效应(孔道形状和尺寸)也将制约着反应分子的吸附结构、电子状态、扩散和反应动力学特性，从而决定着其催化反应性能。本报告将介绍多尺度理论计算(DFT/MC/MD)在分子筛限域催化领域的近期工作进展。主要包括：与探针分子固体核磁共振实验结合建立了酸强度定量测量标尺，确定了不同类型分子筛催化剂的酸特性，揭示了限域孔道对表观酸强度的影响机制；分子动力学模拟结合脉冲梯度场核磁共振实验获取了分子筛孔道内分子的吸附扩散动力学信息，确定了限域孔道内分子的扩散能垒和扩散路径；原位固体核磁共振实验与第一性原理的分子动力学相结合，在皮秒时间尺度下跟踪了分子筛催化反应过程中化学键的生成和断裂过程，阐明了限域孔道中反应中间体形成、寿命与催化反应性能之间的关联。



郑安民，中国科学院精密测量科学与技术创新研究院（原武汉物理与数学研究所）研究员，国家杰出青年基金和优秀青年基金获得者。主要从事分子筛催化材料吸附扩散、酸特性和反应机理的固体核磁共振实验和多尺度理论模拟研究。在 *Science*, *PNAS*, *Sci. Adv.*, *Nat. Protoc.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem.* 等期刊上发表研究论文 100 余篇，应邀为 *Chem. Rev.*, *Chem. Soc. Rev.* 和 *Acc. Chem. Res.* 撰写综述论文，编撰的《分子筛催化理论计算—从基础到应用》2020 年由科学出版社出版。



多相金属催化：从纳米到原子

张涛

中国科学院大连化学物理研究所

负载型贵金属催化剂近百年已广泛应用于能源转换、环境治理以及化学合成等领域。其中，活性金属的分散度(粒径)是决定催化剂活性、选择性和稳定性的关键因素。遗憾的是，对于粒径在几纳米范围的实用金属催化剂，金属分散度通常仍然小于 50%，这意味着约有一半的金属原子不参与反应。因此，制备高分散的金属催化剂长期以来成为人们努力的焦点。

单原子催化 (Single-Atom Catalysis) 的概念在 2011 年被首次提出之后(Nature Chemistry, 2011, 3: 634-641), 已受到了学术界广泛的关注。目前, 单原子催化已经成为催化以及材料等领域的研究热点。除了最大限度地提高原子利用效率外, 单原子催化剂在活性、选择性和稳定性方面还表现出独特性能, 这主要归因于其略带正电和隔离的金属中心。近年来, 随着实用制备技术、表征方法和理论计算方法的快速发展, 大量单原子催化剂被成功制备和报道, 并显示出其在热化学、电化学以及光化学等数十种化学反应中具有优异的性能。本报告将评述单原子催化近年的进展, 并展望单原子催化未来的发展方向。

参考文献:

- [1] B. Qiao, A. Wang, X. Yang, L. Allard, Y. Zheng, Y. Cui, J. Liu, J. Li and T. Zhang, Single-atom catalysis of CO oxidation using Pt₁/FeOx. *Nature Chemistry*, 2011, **3**, 634-641.
- [2] X. Yang, A. Wang, B. Qiao, J. Li, J. Liu and T. Zhang, Single-atom catalysts: a new frontier in heterogeneous catalysis. *Accounts of Chemical Research*, 2013, **46**, 1740-1748.
- [3] A. Wang, J. Li and T. Zhang, Heterogeneous single-atom catalysis. *Nature Review Chemistry*, 2018, **2**, 65-81.



张涛，男，汉族，1963年生，中国科学院院士、发展中国家科学院院士和加拿大工程院国际院士。现任中国科学院副院长，中国科学院大连化学物理研究所研究员。曾任中国科学院大连化学物理研究所所长。

近期主要从事单原子催化、生物质催化转化等方面的研究，所率领的团队在国际上率先提出“单原子催化（Single-Atom Catalysis）”的新概念。首次发现纤维素一步法催化转化制乙二醇的新反应。已在国际期刊发表论文五百余篇，申请发明专利一百余件。曾获国家技术发明二等奖、中国催化青年奖、周光召“应用科学奖”、中科院杰出成就奖、何梁何利科技进步化学奖以及 ChinaNANO Award 等奖励。

现任国际期刊 *Green Chemistry*、*Applied Catalysis B: Environmental*、*ChemPhyChem*、*ACS Sustainable Chemistry & Engineering*、*Industry & Engineering Chemistry Research* 编委或顾问编委，《催化学报》共同主编。



“分子围栏”催化材料

肖丰收

浙江大学

催化在国民经济中扮演着关键的角色，超过 80% 的化学反应过程涉及催化，但当前多数催化剂依然存在活性或选择性不足的问题，尤其针对惰性分子活化转化等极具挑战的反应过程。高效新颖催化剂的设计合成是催化研究永恒的主题，多数是通过催化活性物种本身进行调变以提升性能。不同于这一传统思维，我们提出控制扩散提高催化性能的新策略，设计了“分子围栏”的催化剂理念，据此设计合成了相应的催化剂结构控制关键物种的扩散，实现了低温条件下甲烷高效氧化制甲醇的转化过程。在该研究中发现，氢气和氧气原位生成的过氧化氢物种在反应体系中的空间分布是关键控制因素，因此致力于在介观尺度上控制过氧化氢物种的扩散行为，实现局部高浓度富集以提升其氧化能力。根据这一理念，提出并实现了“分子围栏”催化剂的制备。在低温甲烷氧化反应中，由于疏水壳层的“围栏”效应，过氧化氢物种被富集在沸石晶体内部形成局部高浓度，较传统反应体系浓度提升了四个数量级。得益于这一特性，在 70°C 下，得到 17.2% 的甲烷转化率并且保持甲醇选择性在 92%。该方法通过反应过程中关键物种的富集，实现了催化过程中扩散与反应的高效协同，克服了高甲烷转化率和甲醇选择性不可兼得的领域难题。该研究不仅为甲烷的低温氧化提供了新的催化体系，也为多相催化剂的设计提供了新的思路。



肖丰收，浙江大学求是特聘教授。他于 1983 和 1986 年在吉林大学化学系分别获得学士和硕士学位。1986-1990 年间，作为中日联合培养博士生，分别在吉林大学、大连化学物理研究所、日本北海道大学学习，1990 获吉林大学博士学位，并于 1993-1994 年间在美国加州大学戴维斯分校进行博士后研究，1998 年获得国家杰出青年基金资助。他的研究工作主要从事沸石分子筛和纳米孔材料的合成、表征与催化性能等方面的研究，2021 年获得第三届中国分子筛成就奖。

目前，担任亚洲催化联合会秘书长，美国化学会 **Industry & Engineering Chemistry Research** 副主编。发表论文 500 余篇，他引 25000 余次，授权发明专利 100 余项，在国内与国际会议上做邀请报告与大会 100 余次。



分子筛限域金属催化材料

李兰冬

南开大学

沸石分子筛是一类结晶的微孔氧化物材料，广泛应用于吸附分离与催化等领域。1962年，X型沸石首次应用于催化裂化反应。发展至今，沸石分子筛已经成为石油化工领域最重要的催化材料。分子筛独特的骨架结构为催化活性位点的构筑提供了理想的平台，可以通过多种途径构筑分子筛催化材料。将金属活性中心通过限域的形式引入分子筛结构，构筑分子筛限域金属催化材料，可兼顾金属催化与分子筛催化的特点^[1]。通过简单的合成后处理与原位水热合成路线，我们可以成功制备三种类型的分子筛限域金属孤立活性位点催化材料：i) 分子筛骨架限域金属离子 Lewis 酸中心，如 Ti-BEA、Sn-BEA 等^[2]；ii) 分子筛笼空间限域动态过渡金属中心，如 Cu-CHA^[3]；iii) 分子筛结构限域稳定过渡金属配位不饱和中心，如 Ni@FAU、Co@FAU 等^[4]，这些催化材料在不同反应中表现出差异性催化性能，可实现一些非常具有挑战性的催化转化过程，如甲烷 C-H 键的选择氧化制甲醇以及丙烯的直接空气环氧化制环氧丙烷。本次报告中，我们将重点讨论分子尺度限域效应对金属中心催化行为的影响，以揭示分子筛限域催化的特异性。结构明晰的分子筛限域金属孤立活性位点催化材料可作为理想的模型体系，为催化本质研究提供可能解决方案。

参考文献:

- [1] W. Li, et al. *Chinese J. Catal.* 2019, 40: 1255-1281; Y. Chai, et al. *Acc. Chem. Res.* 2021, 54: 2894-2904.
- [2] B. Tang, et al. *ACS Catal.* 2014, 4: 2801-2810; W. Dai, et al. *ACS Catal.* 2016, 6: 2955-2964. W. Dai, et al. *ACS Catal.* 2020, 10: 14135-14146.
- [3] L. Sun, et al. *Chem* 2021, 7: 1557-1568.
- [4] Y. Chai, et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141: 9920-9927; X. Deng, et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143: 20898-20906; W. Li, et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144: 4260-4268; X. Deng, et al. *CCS Chem.* 2022, 144: 4260-4268.



李兰冬，2001年毕业于南开大学，获理学学士学位；2006年毕业于南开大学，获理学博士学位；现任南开大学杰出教授/博士生导师，主要从事分子筛材料与吸附催化应用研究。曾获天津市自然科学一等奖（2017）、中国分子筛青年奖（2019）与国家自然科学二等奖（2019）；研究成果于《Science》、《Chem》、《J Am Chem Soc》等期刊发表论文 170 余篇，获国家发明专利授权 20 余项。

新型杂原子分子筛材料

吴 鹏

华东师范大学，上海市绿色化学与化工过程绿色化重点实验室

沸石分子筛是能源化工、精细化学品以及煤和生物质碳资源高效利用领域的关键催化材料。设计结构颖，孔径尺寸由微孔向介观尺度增大的大孔径分子筛，在其晶体骨架中构筑具有特定催化功能的杂原子活性中心，创制选择氧化以及骨架杂原子与客体贵金属协同催化材料是该研究领域的热点之一。实现分子筛精准催化需要兼顾其晶体结构、孔道维度和微介尺寸、晶体形貌和取向性以及原子分子水平活性位化学微环境的协调匹配等关键科学问题。

具有结构可塑性特点的二维层状沸石是一类重要分子筛，呈现种类繁多和多样性的发展态势。层状分子筛前驱体具有结构可塑性和可修饰的特性，设计层间溶胀、完全相剥离或部分剥离、分子水平层间插硅扩孔、微介观尺度层板重组排列的新策略，结合杂原子活性中心的构筑，可创制新结构、大微孔、超大微孔以及微介孔复合分子筛材料。这些策略为实现具有 MWW、FER、MFI 和 MOR 等拓扑结构的典型层状分子筛的孔道调控，研发适合大分子转化的精准催化材料提供了有效的技术路线（图 1）。

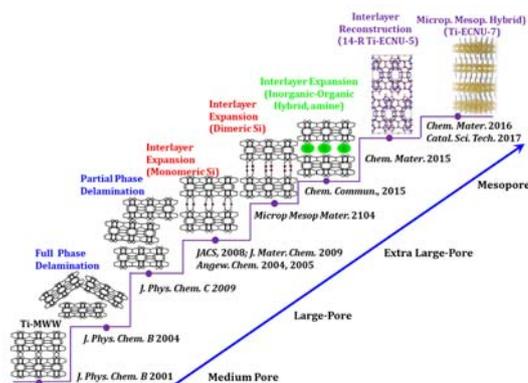


图 1 层状分子筛的孔径工程（MWW 结构为例）

具有骨架导向功能的杂原子金属元素与有机铵结构导向剂的协同作用为合成新结构和大（超大）孔径分子筛提供了新思路，由此研发出了一系列新型的硅锗杂原子分子筛。硅锗分子筛骨架含有的富锗双四元环特定结构单元赋予其结构的可塑性和类层状性，为实现自上而下连续调控孔道尺度，构筑面向选择氧化、固体酸催化以及孔道限域金属催化的活性中心提供了可能。



吴鹏，华东师范大学教授，博导，教育部长江学者，杰出青年基金获得者。南京大学本科毕业，日本东京工业大学博士和博士后，北海道大学特别研究员，横滨国立大学助手。担任 **Microporous Mesoporous Materials** 杂志副主编，**Chinese Journal of Catalysis** 副主编。教育部化学与化工科技委、中国催化专业委员会、分子筛专业委员会、均相催化专业委员会、绿色化学专业委员会委员以及上海市催化专业委员会委员。

获中国石油和化工联合会技术发明一等奖 1 项；上海市科学技术奖 1 项；日本触媒学会等个人研究奖 4 项。先后入选上海市浦江人才、教育部新世纪人才、国家级百千万人才、上海东方学者、上海优秀学科带头人和上海领军人才。从事绿色催化研究，设计合成了系列新型氧化催化杂原子分子筛催化材料，研发了烃类环境友好氧化反应过程，取得了兼备学术意义和实际应用价值的成果。



甲醇制烯烃过程分子筛层次催化剂积炭介尺度结构与机制 研究进展

叶茂、刘中民

中国科学院大连化学物理研究所

基于 SAPO-34 分子筛催化的甲醇制烯烃 (MTO) 过程, 是一个典型的多尺度复杂多相反应过程, MTO 反应新工艺的开发取决于对 MTO 反应机理的认识。将 MTO 微观反应机理用于流化床反应工艺开发, 需要实现 MTO 微观反应机理和流态化反应工程之间的理论关联。理论关联建立的核心在于在不同尺度上, 理解反应和传递的竞争与协同, 并将其对相应的介尺度结构形成机理和控制机制进行定量描述。本报告针对分子筛内催化剂积炭的介尺度结构及其对低碳烯烃选择性的影响, 重点介绍在分子筛表界面尺度上, 反应和扩散两种机制竞争和协调对催化剂积炭分布介尺度结构的形成和演化的作用, 以及相应的数学理论描述。首先, 开展了基于 SAPO-34 分子筛的反应与传质理论和实验研究, 建立了客体分子反应扩散的定量描述。通过对 MTO 过程进行深入研究, 发展了基于双环反应机理的反应动力学 (*Chem. Eng. J.*, 2017, 329: 35-44; *AIChE J.*, 2019, 65: 662-674), 并实现了分子筛晶粒表面扩散阻力和晶内扩散阻力的解耦, 第一次采用吸附速率法测量了不同分子筛晶体内扩散系数 (*Comm. Chem.*, 2019, 2: 43)。其次, 基于过渡态理论和客体分子的运动配分函数, 发展了不同分子筛拓扑结构中客体分子的晶内扩散系数的理论关联 (*AIChE J.*, 2020, 66: e16991), 据此建立了分子筛晶体尺度的反应-扩散模型 (*Chem. Eng. Sci.*, 2016, 147: 1-12; *Chem. Eng. J.*, 2019, 377: 119668)。同时, 基于该模型实现 MTO 工业催化剂中 SAPO-34 分子筛晶体内反应与扩散过程成像, 直接获取了反应中客体分子、积碳物



种以及酸性位点的时空分布与演化,为通过催化剂积碳来调控甲醇制烯烃反应性能提供了理论基础 (*Nature Comm.*, 2020, 11: 3641)上。在此基础上,成功实现了通过改变 SAPO-34 分子筛表面传质阻力来调控 MTO 过程催化剂寿命和烯烃选择性 (*Angew Chem Int Edt.*, 2020, 59: 21945-21948),通过选取合适的探针反应实现了分子筛内反应扩散介尺度机制竞争协调作用的高分辨荧光成像 (*Angew Chem Int Edt.*, 2022, 61: e202203903.),提出了 MTO 反应过程中分子筛拓扑结构和客体分子晶内扩散系数与产物选择性的定量数学关系 (*AIChE J.*, 2022, 68: e17881)。同时,基于分子筛尺度的反应-扩散调控,发展了采用水蒸气将催化剂内非活性积碳物种转化为活性物种的新的再生方法,可实现大幅度提高 MTO 低碳烯烃选择性和降低再生烟气 CO₂ 排放,实现了 C 原子高利用率 (*Nature Comm.*, 2021,12: 17)。



刘中民, 1964 年生于河南省。理学博士, 研究员, 博士生导师, 中国工程院院士。现任中国科学院大连化学物理研究所所长、低碳催化技术国家工程研究中心主任、国家能源低碳催化与工程研发中心主任。

面向国家能源战略需求, 长期从事能源化工领域应用催化研究与技术开发, 完成了多项创新成果并实现产业化。在分子筛结构酸性位的精确调控机制、甲醇反应化学动力学以及催化反应工程等方面取得了重要研究成果。他组织开发了甲醇制烯烃(DMTO)技术, 率先在世界上实现工业化, 又相继成功开发了 DMTO-II、DMTO-III 等换代技术, 持续保持 DMTO 技术的国际领先地位。截至目前, DMTO 系列技术已签订 31 套装置的专利技术实施许可合同, 烯烃产能达 2025 万吨/年, 其中已投产的工业装置 16 套。领导开发合成气制乙醇(DMTE)技术, 完成了世界首套 10 万吨/年煤基乙醇工业示范项目, 截至目前, 已成功签订技术实施许可合同 10 套, 乙醇产能 285 万吨/年。DMTO 和 DMTE 技术的开发与应用对保障我国能源安全、煤炭清洁化利用以及缓解大气污染等具有重要战略意义。刘中民还先后完成了丙烯水合制异丙醇、丁烯与醋酸制醋酸仲丁酯、甲醇制二甲醚等新技术并实现了工业化应用。刘中民已培养研究生 50 多名, 出版学术专著一部, 发表研究论文 520 余篇, 获得授权专利 650 余件。曾荣获国家技术发明奖一等奖、国家科技进步奖一等奖、辽宁省科学技术最高奖、何梁何利基金科学技术创新奖、中国催化成就奖、美国化学工程师协会(AIChE)绿色过程工程创新成就奖等多项国内外奖励及荣誉。



石油炼制催化加氢过程介催化问题探讨

李明丰

中国石油化工股份有限公司石油化工科学研究院

催化加氢是支撑现代石油炼制工业的重要基础，主要应用于清洁燃料生产、化工原料生产和重组分转化。2021年中国加氢处理装置加工量达到 5.49 亿吨，占原油实际加工量的 78%。涉及的主要化学反应包括硫化物、氮化物的加氢脱除，芳烃的加氢饱和，烃类的加氢裂化等，其核心挑战始终是活性问题、过程选择性问题和产物选择性问题。由于催化加氢的原料为硫化物、氮化物、芳烃等多组分共存的混合物，存在显著的交叉影响。例如氮化物、硫化氢和芳烃的存在对有机硫化物脱除有显著的抑制作用。氮化物对烃类加氢裂化反应有显著抑制作用等。本文以三个示例，从介催化视角讨论如何消除交叉影响。

(1) 固定床柴油加氢脱硫。因各反应物反应动力学差异，沿反应器轴向形成不断变化的微环境，脱硫反应动力学控制步骤随之发生变化。采用不同类型催化剂级配，相对脱硫活性较单一催化剂可以提高 50~100%；(2) 加氢裂化是放热反应，反应器床层温度沿轴向逐步升高。为稳定运行，需要在床层间通入大量冷氢控制温度。不同活性催化剂级配使用可以减少冷氢用量，提高能量利用效率，同时对产物选择性产生影响。(3) 研究发现，在加氢催化剂床层中增加极性吸附剂，可以有效降低芳烃加氢饱和率。其根本原因是吸附剂对芳烃的选择性吸附从介尺度上为芳烃提供了专属流道，减少了芳烃在加氢活性中心上的吸附。总体而言，催化加氢介催化至少可以从以下两个角度发挥作用：(1) 利用催化材料级配适应介尺度上反应环境的变化，(2) 为催化材料创建更为有利的反应环境。



李明丰，教授级高工，现任石油化工科学研究院院长，党委副书记。主要研究领域包括石油炼制、废塑料化学回收、生物质加工、费托合成及合成油提质、CO₂转化利用、氢能生产利用、石化行业双碳核算。获得国家和省部级奖励6项。获得授权专利515件，发表专业论文100余篇。



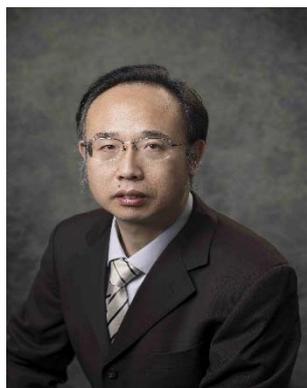
催化反应与扩散传质耦合的介尺度模拟

葛 蔚

中国科学院过程工程研究所

分子筛催化剂的性能不仅决定于其晶体内活性中心的组成、所处的反应气氛与热力学状态，还受其多级孔结构的极大影响。其中晶胞内孔在埃量级，晶粒间隙在纳米量级，而部分通往催化剂颗粒表面的孔道直径可达亚微米量级。这些孔道相互连通为复杂的网络，决定了催化活性中心的分布以及反应与扩散过程的协调。只有在一个包含完整孔径分布的足够大的体积单元中，反应与扩散的协调才能表现出稳定的统计性质，这正是分子筛晶胞与催化剂颗粒整体间的介尺度。

对此介尺度，微观的分子动力学模拟的计算量巨大，而宏观的多孔介质模拟缺乏有效的本构关系，硬球-拟颗粒模拟（HS-PPM）则提供了精度与计算量均可接受的有效手段。基于 HS-PPM 的研究初步揭示了反应与扩散耦合导致活性位附近反应物和生成物非随机涨落的机理，以及通过优化多级孔道结构和尺度分布提高反应效率与选择性的可能途径。同时该方法与计算流体力学的跨层次多尺度耦合也将为构建复杂流动条件下催化剂颗粒的表观反应动力学模型并揭示其积碳与失活机理提供有力工具。



葛蔚，中国科学院过程工程研究所研究员、多相复杂系统国家重点实验室主任；中国科学院大学岗位教授、博导；中国化工学会模拟与仿真专业委员会主任委员，中国颗粒学会常务理事。入选国家百千万人才工程，曾获国家自然科学基金委杰出青年基金，周光召基金会首届“杰出青年基础科学奖”、中国化工学会“侯德榜化工科技创新奖”、中国颗粒学会“宝洁青年颗粒学奖”。针对流动、传递、反应耦合过程的介尺度机理与多尺度建模提出了拟颗粒模拟，完善了气固和气液等系统的介尺度模型，主持研制了 **Mole** 系列多尺度模拟软硬件系统。



等级孔分子筛催化材料

陈丽华

武汉理工大学

物质扩散传质规律及调控是多相催化反应过程的重要科学问题之一。以分子筛为代表的多孔材料广泛应用于诸多工业多相催化过程，但是其小于 2 纳米的微孔孔道存在着扩散限制问题，严重阻碍了有机反应分子的传输及催化转化，大大降低了分子筛材料的催化性能。等级孔材料是指在同一主体材料中具有两种或者两种以上孔道，且孔道结构具有层次性、规则性及贯通性特征的一类多级孔材料。我们将高效等级孔扩散体系引入到了分子筛材料中，构筑跨尺度贯通等级孔结构，为克服传统微孔分子筛的扩散限制难题提供了有效的解决思路。然而，等级孔分子筛的设计合成及催化应用仍然存在巨大的挑战。在合成方法学上，精准合成及定量调控依然是一大难题，同时高效等级孔扩散体系缺乏设计理论的支撑。近年来，我们发展了甘油半固相转晶、纳米晶原位自组装和等级孔限域晶化等策略，获得一系列等级孔分子筛材料，实现了等级孔道结构的可控调节，探究了等级孔结构对扩散性能的促进机制以及与其催化性能的构效关系，并拓展了等级孔分子筛单晶催化体系的研究。在此基础上，进一步探索高效等级孔扩散结构的理性设计依据，指导高性能等级孔分子筛材料的合成。



陈丽华, 2009 年获吉林大学博士学位, 2011 获比利时那慕尔大学博士学位。入选湖北省楚天学者计划, 现任武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室研究员、博士生导师。从事等级孔功能材料及其能源环境催化应用基础研究, 在 *Chem. Rev.*、*Chem. Soc. Rev.*、*Natl. Sci. Rev.*、*Matter*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*Adv. Mater.* 等学术期刊发表系类论文, 授权发明专利 50 余项。获第一届“中国分子筛新秀奖”、湖北省自然科学一等奖。主持国家自然科学基金重点项目、湖北省杰出青年基金等项目, 担任石化联合会催化联盟青年工作委员会委员, *Wiley* 杂志《*Interdisciplinary Materials*》学术编辑及《*Chemical Synthesis*》青年编委。



分子筛催化的固体核磁共振研究

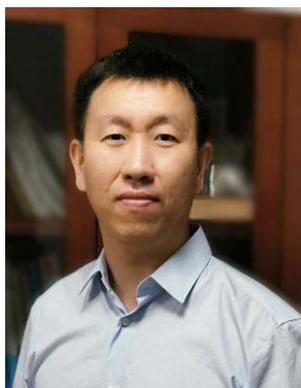
徐君, 邓凤

中国科学院精密测量科学与技术创新研究院, 波谱与原子分子物理
国家重点实验室

分子筛由于具有规整的亚纳米孔道结构、良好的水热稳定性、以及可调变的表面酸性等优点已被广泛应用于各种工业催化过程。研究分子筛催化剂活性中心的结构与性能、孔道限域效应以及催化反应机理, 建立催化剂的构-效关系, 对于分子筛催化性能的改善以及新型催化剂的研发都具有重要的意义。报告将介绍多共振与多维谱方法固体核磁共振方法及其在分子筛催化研究中的应用, 主要包括: (1) 分子筛催化剂活性位的精确表征以及活性位的协同作用研究; (2) 分子筛限域孔道中分子间相互作用表征; (3) 原位 NMR 方法及其在分子筛上低碳分子 (甲烷、甲醇等) 的活化与转化研究中的应用。

参考文献:

- [1] Wang, W.Y.; Xu, J.*; Deng, F.* *Natl. Sci. Rev.* **2022**, 9: nwac155
- [2] Qi, C. D.; Wang, Q.; Xu, J.*; Deng, F. *Chem. Soc. Rev.* **2021**, 50: 8382
- [3] Xu, J.*; Wang, Q.; Deng, F.* *Acc. Chem. Res.* **2019**, 52, 2179.
- [4] Hu, M.; Wang, C.; Chu, Y. Y.; Wang, Q.; Li, S. H.; Xu, J.*; Deng, F. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, e202207400
- [5] Wang, C.; Chu, Y.Y.; Hu, M.; Cai, W.J.; Wang, Q.; Qi, G.D.; Li, S.H.; Xu, J.*; Deng, F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 26847
- [6] Wang, C.; Hu, M. Chu, Y.Y.; Zhou, X.; Wang, Q.; Qi, G.; Li, S.H.; Xu, J.*; Deng, F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59:7198
- [7] Zhou, X.; Wang, C.; Chu, Y.; Xu, J.*; Wang, Q.; Qi, G. D.; Zhao, X. L.; Feng, N. D.; Deng, F.* *Nat. Commun.* 2019, **10**, 1961



徐 君，中国科学院精密测量科学与技术创新研究院（原中科院武汉物理与数学所）研究员，现任材料化学磁共振研究部主任。2007年获中科院武汉物理与数学研究所博士学位，英国卡迪夫大学、法国里尔大学访问学者。主要从事先进固体核磁共振谱学方法与技术发展以及在多相催化反应体系中的应用研究。在 *Nat. Catal.*、*Nat. Commun.*、*Chem. Soc. Rev.*、*Acc. Chem. Res.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Chem. Sci.*、*ACS Catal.*，等期刊上发表 SCI 论文 160 余篇，与团队合著英文专著一部（*Solid-state NMR in zeolite catalysis*, Springer）。获得国家优秀青年基金（2016）以及国家杰出青年基金（2022）资助，英国皇家学会“牛顿高级学者”，现任美国国家强磁场实验室用户委员会执委，担任《波谱学杂志》、《高等学校化学学报》、*Magnetic Resonance Letter* 以及 *Chemical Synthesis* 编委，获得中国分子筛青年奖（2019）。。



合成气转化直接制高值化学品选择性调控

钟良枢

中国科学院上海高等研究院

合成气由一氧化碳和氢气组成，可由各种含碳资源如煤、天然气以及生物质等转化而得。合成气转化直接制高值化学品是含碳资源清洁高效利用的重要途径，有利于促进我国能源化工往高端化、多元化、低碳化发展。合成气催化转化最大的瓶颈问题为如何有效控制 C-O 键的活化、C-C 键的形成、碳链增长及中止行为，进而实现对产物选择性的有效调控。合成气转化过程放热强且涉及复杂的反应网络，多个平行反应或二次反应同步进行，产物分布较为复杂。此外，合成气转化过程常存在 CO₂、CH₄ 等 C1 副产物选择性过高的问题，从而降低整体过程碳效。为实现特定化学品的高选择性合成，需要同时考虑催化科学及反应工程，通过从不同空间尺度精准构筑反应活性位结构及介观环境，设计 CO 活化及转化新路径进而调控反应网络。本报告主要围绕合成气高选择性转化制烯烃、高碳醇等化学品，阐述不同空间尺度下的催化剂结构设计、产物选择性调控等方面的进展及面临的挑战。



钟良枢，男，现任中科院上海高研院研究员，中科院低碳转化与工程重点实验室主任。2003年本科毕业于北京化工大学；2008年博士毕业于中科院化学所；2008年至2010年在德国慕尼黑工业大学进行博士后研究。2010年至今工作于中科院上海高研院，主要从事能源催化及C1化学研究。已在 *Nature*、*Nature Chemistry*、*Accounts of Chemical Research*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*Chem*、*ACS Catalysis*、*Journal of Catalysis* 等发表 100 余篇文章，近几年连续入选爱思唯尔中国高被引学者榜单。曾获中国化学会-英国皇家化学会青年化学奖、国家“万人计划”青年拔尖人才、上海市科技领军人才、上海市优秀学术带头人、上海市科技系统青年五四奖章、中科院青年科学家奖、中科院优秀导师奖、中科院上海分院系统杰出青年科技创新人才、中科院青促会优秀会员等奖励或称号。



介尺度调控机制下高性能丙烷脱氢催化剂的创制

朱海波

福州大学

低碳烯烃是重要的基本有机化工原料，是现代化学工业的基石。在“碳达峰、碳中和”战略实施的背景下，丙烷脱氢制丙烯受到了化工行业空前的关注。该路线不仅为丙烯的生产提供低碳、清洁的生产方式，而且副产的氢气将成为稳定的氢能供应。目前已工业化的丙烷脱氢 Pt 催化剂仍存在活性不足、选择性低、稳定性差等问题。本报告基于对 Pt 催化剂所蕴含的介尺度科学问题的深入研究，创制出了高性能的丙烷脱氢 Pt-Sn/Al₂O₃ 和 Pt-Sn@zeolite 催化剂。

Pt-Sn/Al₂O₃ 和 Pt-Sn@zeolite 这两类催化剂中存在两个层次介尺度：“介尺度的 Pt-Sn 活性中心”和“介观结构的载体微环境”。Pt-Sn 活性中心的尺度介于单原子和纳米尺度之间，载体微环境的尺度介于纳米和微米尺度之间。Pt-Sn/Al₂O₃ 为“开放式”结构，Pt-Sn 团簇负载在 Al₂O₃ 的表面；而 Pt-Sn@zeolite 为“封闭式”结构，Pt-Sn 团簇封装在分子筛的孔道中。催化表征及模拟计算表明：介尺度的 Pt-Sn 活性中心的存在形式和演化过程很大程度上依赖于介观结构的载体微环境。Pt-Sn 活性中心初始状态为亚稳态，在高温反应过程中会发生迁移和团聚，最终在介观结构的载体微环境中形成热力学稳定的 Pt-Sn 团簇。具体结论如下：(1)介尺度的 Pt-Sn 团簇具有高的丙烷脱氢性能；(2)通过表面化学法和双核金属配合物分解法能在 Al₂O₃ 表面得到高分散的介尺度的 Pt-Sn 团簇；(3)基于分子筛的孔道的限域效应能得到分子筛封装的 Pt-Sn 团簇；(4)Pt-Sn 团簇在常规 Al₂O₃ 表面不稳定、易发生烧结，而介观结构的 Al₂O₃ 由于结构中存在丰富的五配位铝能将 Pt-Sn 团簇稳定；(5) Pt-Sn 团簇会从小晶粒分子筛的孔道中



迁移到外表面而发生团聚。介观结构的分子筛中，由于 Pt-Sn 团簇迁移路径的延长，Pt-Sn 团簇在迁移中发生轻度的团聚形成多聚体而“卡”在分子筛的孔道中变得异常稳定。基于介尺度上对 Pt 催化剂的系统认知，研制出了抗烧结的 Pt-Sn/Al₂O₃ 和高稳定性的 Pt-Sn@zeolite 催化剂。Pt-Sn@zeolite 催化剂表现出了超高的稳定性，在长达 6 个月的反应中没有出现失活，是目前报道的最稳定的丙烷脱氢催化剂。上述研究不仅具有一定的科学价值，而且为丙烷脱氢工业催化剂的开发提供了理论参考。



朱海波，男，福州大学“闽江学者”特聘教授，博士生导师。主要从事低碳烷烃脱氢制烯烃、先进催化材料、表面化学等方向的研究。先后主持国家自然科学基金 3 项，承担科技部重点研发计划“催化科学”重点专项课题 1 项、企业合作重点项目 1 项。在国际催化主流学术期刊上发表论文 50 余篇，申请发明专利 20 余件，在国际、国内重要的学术会议上做 10 余次学术报告。



车用燃料电池非贵金属催化剂及介催化过程研究

孙世刚

固体表面物理化学国家重点实验室，化学化工学院，厦门大学

我国以质子交换膜燃料电池为动力的电动汽车已进入产业导入期。然而，其大规模商业化仍然受铂金属资源稀缺的限制。开发非贵金属氧还原催化剂是降低燃料电池成本、推进燃料电池汽车快速发展的重要途径。本文阐述我们对金属/氮/碳材料非贵金属氧还原电催化剂的活性位结构设计、三相界面构筑和传输通道调控，显著提升其电催化活性、稳定性和非贵金属燃料电池器件输出功率的最新进展。



孙世刚，中国科学院院士，国际电化学会、英国皇家化学会、中国化学会、中国化工学会、中国微米纳米技术学会会士。现任厦门大学化学化工学院教授、固体表面物理化学国家重点实验室学术委员会主任、中国化学会副理事长、中国微米纳米技术学会常务理事。长期从事电催化、谱学电化学和能源电化学研究。获国家自然科学基金二等奖、教育部自然科学奖一等奖，中国光谱成就奖、中法化学讲座奖、国际车用锂电池协会终身成就奖、国际电化学学会 Brian Conway 物理电化学奖章等科技奖项。担任 *J Electroanal Chem*, *Func Mater Lett*, *ACS Energy Lett*, *Electrochem Energy Rev*, *National Sci Rev*, *J Solid State Electrochem*, *JMCA* 等学术期刊编委，国际电化学会会刊 *Electrochimica Acta*，《化学学报》、《化学教育》等学术期刊副主编，中国电化学会会刊《电化学》主编。获福建省杰出人民教师，全国优秀科技工作者、国家级教学名师，全国模范教师、全国教材建设先进个人和全国先进工作者等荣誉。



碱性聚合物电解质催化体系

庄林

武汉大学化学与分子科学学院

在过去的 10 年里，基于碱性聚合物电解质的变革性电化学技术实现了从无到有的发展。目前，碱性聚合物电解质已实现商品化，并应用到燃料电池、水电解、CO₂ 电解转化等领域。基于碱性聚合物电解质的电化学体系的催化行为，与传统的水溶液电解质和质子交换膜电解质体系都有所不同，为电催化带来全新的科学内涵和技术方向。

在这个报告中，我将介绍近年来我们课题组在碱性聚合物电解质与相关电催化方面的研究进展，包括碱性聚电解质燃料电池(APEFC)和工业级电流密度 CO₂-纯水碱性膜电解器，以及提升电催化选择性的表面化学场耦合策略。此项研究得到国家自然科学基金重大研究计划“碳基能源转化利用的催化科学”的重点和集成项目的资助。



庄林，武汉大学查全性讲席教授。1993 年毕业于武汉大学化学系，1998 年在武大获博士学位并留校任教。2004~2005 年美国康奈尔大学化学系访问学者。曾任美国电化学学会（ECS）中国区主席、国际电化学学会（ISE）物理电化学分会副主席。现任中国化学会电化学专业委员会副主任，**ACS Sustainable Chemistry & Engineering** 副主编。

2004 年获中国化学会青年化学奖，2007 年获首届中国电化学青年奖，2011 年获国家杰出青年科学基金，2015 入选教育部长江学者奖励计划特聘教授，2016 年入选国家高层次人才特殊支持计划（万人计划）科技创新领军人才。主要研究方向是洁净能源电化学转化，涵盖“计算-材料-催化-器件”四个方面。

燃料电池催化剂

魏子栋

重庆大学化学化工学院

燃料电池作为新一代的理想动力电池，探究认识其在电催化反应中不同层次和尺度下的介催化行为，对进一步强化电催化反应以及物质扩散传递、提效降耗具有重要意义。电化学催化过程主要是由发生在电极界面的液相传质、物种吸脱附、电子转移以及表面转化等单元步骤串联组成，是具有时空多尺度特征的复杂系统。该多尺度特征具体体现在：量子尺度的电子转移；原子尺度的活性位；分子水平的电催化催化机理；纳米尺度的催化剂与质子导体；微米尺度的催化层；数十微米尺度的扩散层；以及厘米到分米尺度的多孔电极等。各尺度下材料结构、反应传递响应时间能否有效匹配则决定了电化学催化过程的效率。因此，理解不同结构、层次的介尺度行为，以及从介尺度视角出发，探寻具有多尺度特征的电极构筑、电化学催化机理以及电催化剂设计，是精确提升电催化性能的关键。

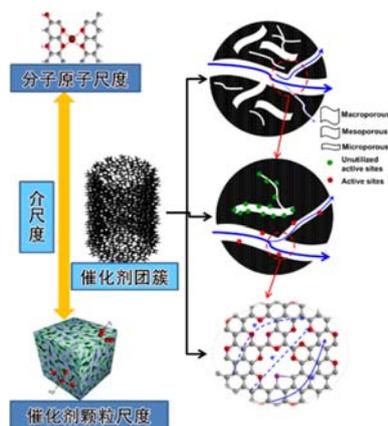


图 1. 燃料电池催化剂的介尺度特征

本次报告从多级孔电极的设计、催化剂表界面活性位构筑与调控两个维度，发现和解决介尺度燃料电池催化剂的相关科学问题。从催化剂团簇微观几何结构设计出发，通过构建高度贯通有序多级孔传质通道、类神经网络超薄催化层、高度暴露三相活性位界面等，实现催



化剂介尺度结构有效调控，达到最大程度呈现催化剂活性的目的；以理论计算为指导，结合实验验证，通过调控晶体结构、化学组成、核壳作用、界面效应、配体效应、应变效应等手段，大幅提升催化剂活性、稳定性、耐毒性。



魏子栋，重庆大学化学化工学院教授，教育部长江学者特聘教授，国家重点研发计划项目首席科学家，国家自然科学基金重大项目首席科学家，国家自然科学基金“多相反应传递与转化调控”创新群体骨干成员，“化工过程强化与反应”国家地方联合工程实验室主任，中国石油和化学工业联合会“电解水耦合绿色化工合成”重点实验室主任，重庆大学“锂电及新材料遂宁研究院”院长。先后于 1984 年、1987 年和 1994 年在陕西科技大学、陕西师范大学和天津大学获得学士、硕士和博士学位。是《Chinese Journal of Catalysis》、《Nano Material Science》、《Frontiers in Chemistry》、《催化学报》和《电化学》等杂志副主编，《化学学报》、《化工学报》、《物理化学学报》、《化学通报》、《过程工程学报》、《储能科学与技术》、《Electrochem Energy Review》、《The Scientific World JOURNAL: Chemical Engineering》和《Innovations in Corrosion and Materials Science》等杂志编委。获省部级科学技术奖励一等奖、二等奖各 1 次；中国化工学会科学技术奖励一等奖 1 次；国务院政府特殊津贴专家，全国宝钢优秀教师奖，唐立新基金会优秀科研一等奖；发表学术论文 300 余篇，他引 22 000 多次，申请发明专利 41 项，获授权 33 项；出版《电化学催化》、《氧气电还原》专著 2 部。



二氧化碳电催化还原

汪国雄

中国科学院大连化学物理研究所

二氧化碳(CO_2)电催化还原作为一种极具发展潜力的负碳技术,以可再生电能为能源将 CO_2 电化学转化为高附加值燃料和化学品,是提升新能源消纳水平和实现碳循环利用的有效途径。然而, CO_2 分子具有对称的碳氧双键结构,热力学极其稳定,与金属表面相互作用弱,吸附活化难;析氢副反应具有相近的平衡电势且动力学速率更快, CO_2 电催化还原反应路径复杂、产物多样,产物选择性难以调控; CO_2 电解器件阴极 CO_2 电催化还原和阳极析氧反应过电势高,动力学速率缓慢,造成能量转化效率不佳。

电化学界面集中了多相催化和电化学的双重复杂性,包括表面吸附和成断键、离子传输和电荷转移、物料分配和水热管理等。 CO_2 电催化还原亟需解决的关键科学问题是:(1)电化学界面上 C-O 键高效活化和 C-C 键定向偶联,优化催化表界面结构和电极局域环境,精准调控阴极电催化反应路径来提高产物法拉第效率(反应选择性);(2)电化学界面上气液两相输运、离子传输和电荷迁移,优化气体扩散电极孔结构、亲/疏水性、离子和电子传输通道来提高电流密度(反应转化率);(3)电化学界面的微观结构和动态演化,抑制反应条件下电催化材料和界面衰减来实现电解器件高效稳定运行(反应稳定性和能量转化效率)。

介催化的核心是“反应中心+外围组织”,在催化活性位和电极局域环境构成的电化学界面,电极局域环境类似于介催化的“外围组织”。在本报告中,我们将介绍国内外研究团队通过优化电极局域环境来提高 CO_2 电催化还原性能的研究进展:(1)调控液态电解质中阴阳离子

种类和 pH 值来提高 CO₂ 电催化还原制 C₂₊产物的法拉第效率>80%；(2)优化聚合物电解质促进电极内部物质输运来提高 CO₂ 电催化还原制 C₂₊产物的电流密度>1 A cm⁻²；(3)设计兼具离子传导和协同催化两种功能的聚合物电解质，研制出工业级电流密度、高选择性、低电解槽压(即高能量转化效率)的碱性膜电解器件，实现 CO₂/纯水共电解制备乙烯。

开展基于介催化的电极局域环境调控，为优化 CO₂ 电催化还原选择性、活性和稳定性提供了新的研究策略，有望推动 CO₂ 电解技术走向实际应用。



汪国雄，博士，中国科学院大连化学物理研究所研究员，碳基资源电催化转化研究组长。2000 和 2006 年分别在武汉大学和中国科学院大连化学物理研究所获得理学学士和博士学位。2007 年 9 月-2010 年 12 月在日本北海道大学催化科学研究中心从事博士后研究，之后进入催化基础国家重点实验室工作。主要从事 CO₂ 电催化还原制燃料和化学品研究，在 *Nat. Commun.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Adv. Mater.*, *Energy Environ. Sci.*等期刊发表研究论文 120 余篇，授权中国发明专利 10 件。作为核心成员获得 2017 年全国创新争先奖牌，2019 年入选中国科学院青年创新促进会优秀会员，2021 年获得国家杰出青年基金项目资助。





论坛须知

热忱欢迎各位代表参加本次论坛，为保证您在论坛期间的工作、生活顺利，请您注意以下事项：

一、现场参会代表报到与会议服务

报到时间：2022年10月31日下午

报到地点：世纪金源香山商旅酒店

会议提供专家接送用车及食宿，请将航班、车次及市内接送地址信息提前告知会务组联系人，以便安排接送及预订住宿房间。

二、会议时间地点

会议时间：2022年11月1日8:30开始，会期一天

会议地点：世纪金源香山商旅酒店金都宴会厅A厅（B1层）

腾讯网络会议号：570-947-057，无密码

三、防疫须知

1. 所有与会者须凭代表证入场，并经过体温检测（37.3度），会议期间要求全程佩戴口罩。

2. 在酒店用餐人员须依酒店规定在指定进餐区域、座位就餐，保持安全距离，且完善自身防护措施（如口罩、洗手液等）；

3. 会议期间，签到处设置防疫用品补给处，包括口罩和消毒用品，方便大家取用。

因为疫情防护，给大家带来不便，请各位谅解。



四、会务组联系人

- | | | |
|--------|---------------|-------------|
| 1. 郑仁垟 | 中国石化科技部 | 15911173536 |
| 2. 程赟绿 | 中国石化综合管理部 | 18811578900 |
| 3. 周云帆 | 中国石化石油化工科学研究院 | 13811974957 |
| 4. 刘文明 | 中国石化石油化工科学研究院 | 13269202131 |
| 5. 金中豪 | 中国石化上海石油化工研究院 | 13524002011 |

五、会场地理位置



酒店名称：世纪金源香山商旅酒店

酒店地址：北京市海淀区北正黄旗 59 号

总机电话：010-59898888

七、特别说明

“科学与技术前沿论坛”是中国科学院学部开展的高层次学术活动，着眼于科学技术前沿探索、系统评述和前瞻预测。为共同推进我国科技事业的发展，让学术思想广泛传播，中科院学部将对论坛的报告进行录制并在剪辑加工之后发布到互联网进行传播。现特此声明，如您对此有异议，可与会务组工作人员联系，协商解决。



科学与技术前沿论坛