

“十四五”国家重点研发计划“催化科学” 重点专项 2021 年度项目申报指南 (征求意见稿)

“催化科学”重点专项的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，实现精细化学品和新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。

2021 年，本重点专项将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、可再生能源转换的催化科学、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 个方向部署项目，拟优先支持 19 个研究方向。同一指南方向下，原则上只支持 1 项，仅在申报项目评审结果相近、技术路线明显不同时，可同时支持 2 项，并建立动态调整机制，根据中期评估结果，再择优继续支持。

申报单位根据指南支持方向，围绕重大科学问题和关键技术进行设计。项目应整体申报，须覆盖相应指南方向的全部内容。项目执行期一般为 5 年。指南方向中拟支持的项目下设课

题数不超过 4 个，每个项目参与单位总数不超过 6 个。

指南方向 7 是青年科学家项目，支持 35 周岁以下青年科研人员承担国家科研任务，也可参考指南方向 1-6 中标*的方向组织项目申报（但不受研究内容限制）。青年科学家项目不设课题。

1. 催化基础与前沿交叉

1.1 纳米及团簇结构的表界面催化研究

面向能源小分子的精准催化转化，研究氧化物基纳米及团簇催化剂表界面缺陷结构的调控规律和催化作用原理。认识界面催化体系中的限域催化和反应协同等效应的化学本质，阐明活性位点在反应中的动态稳定机制；揭示活性位点上 C-O 和 C-H 等化学键活化以及中间体形成和转化的热力学和动力学规律，力争形成化学键精准构建的催化新概念和新理论。

1.2 惰性有机分子高效催化转化研究*

针对惰性有机分子高效活化的关键科学问题，研制高活性和高选择性的催化剂，发展新型高效过渡金属催化、电催化等催化转化过程。深入认识 C-H 键活化、物种插入、化学键选择性断裂与重组等过程的机制，揭示惰性有机分子催化转化的反应机理，实现功能分子的高效构建。

1.3 催化氢化和氢元素化反应研究*

发展新型高活性稀土金属及丰产金属催化体系，通过对配体、金属价态及自旋态的调控，发现新的活化模式，揭示催化剂构效关系，精准调控催化活性及选择性，发展不饱和化合物

的高效氢化、氢元素化反应（如硅氢化、硼氢化、磷氢化等），实现手性功能分子精准合成和战略元素资源化利用。

2. 催化剂创制

2.1 氧化铝等多孔催化材料创制

针对高端氧化铝等多孔催化材料制备科学中的核心问题，发展多孔材料的体相结构（晶型）、表面化学（配位、缺陷）和物理结构（孔结构）的多尺度精准调控方法，形成高端多孔催化材料的制备和成型新技术；针对烷烃脱氢、催化重整等几类关键石油化工催化剂，揭示金属活性组分在氧化铝等多孔载体表面的赋存形式及工况条件下动态演化规律；形成具有自主知识产权的高端氧化铝等多孔催化材料核心技术，满足移动床应用的高强度（ $> 35 \text{ N}$ ）、低堆比（ $< 0.60 \text{ g/ml}$ ）、孔体积极高（ $> 0.65 \text{ ml/g}$ ）、粒度分布均匀（ $1.5 \sim 1.8 \text{ mm}$ ， $> 98.0\%$ ）等要求。

2.2 基于晶态孔材料的仿酶催化体系研究

多相催化反应空间的微环境对催化性能具有重要的影响。突破传统多相催化剂的结构与反应机制，基于晶态孔材料探索具有仿酶结构与功能的多相催化剂的精准合成与调控，发展新型催化剂骨架结构，探索控制孔内微观结构实现高效多相催化剂的精准合成与调控；在限域的微反应空腔内构建多级次活性位点，实现温和条件下高效催化转化甲烷、二氧化碳等小分子以及生物质分子。

2.3 面向重要催化过程的单原子催化剂创制

发展单原子催化剂的制备与稳定方法，在原子尺度上实现单原

子催化剂的组成和结构调控,最大限度的提高催化剂的催化效率,促进单原子催化剂在不同催化反应的应用。探索活性位点的局域结构在反应中的动态变化规律,阐明活性位点距离效应;面向重要的催化过程实现高活性、高选择性、高稳定性的单原子催化剂宏量制备,贵金属原子利用率大于 90%。

3. 催化原位动态表征与模拟

3.1 原位动态表征技术及催化机理研究*

利用大科学装置等先进的表征手段,聚焦重要催化反应实现高时空分辨和高灵敏探测。发展催化反应的原位和在线表征技术,揭示催化反应活性中心等时空和能量匹配的物理化学机制;发展多组分稳态同位素瞬变动力学分析及与理论计算耦合新技术,量化催化剂动态结构与原位动力学信息之间的内在联系,建立能定量描述催化剂结构动态变化的动力学模型。

3.2 数据驱动的催化剂理性设计新方法研究

超越传统的试错开发模式,结合第一性原理计算与人工智能技术,开展数据驱动的催化模拟、催化剂理性设计和催化理论探索研究。基于数据训练开发催化描述符提取算法,发展针对目标逆向预测反应路径的机器学习方案,形成自动化催化剂设计软件并逐步引导实验研究摆脱试错模式;基于概率相关性从海量数据中推导结构、谱学表征、电子态、催化性能之间的数学关系,力争产生原创性的催化新理论。

4. 可再生能源转换的催化科学

4.1 可规模化太阳能光催化分解水制氢研究*

聚焦太阳能光催化分解水制氢中的关键科学难题与技术挑战，以光催化完全分解水制氢为目标，发展半导体光催化材料体相内建电场的构建策略及光生电荷分离研究方法，发展微纳尺度上集成光催化剂体系的构筑思路与方法，实现高效稳定的光催化分解水制氢过程，太阳能制氢效率超过 2%，并探索能够实现可规模化太阳能分解水制氢的可行性策略。

4.2 固体电解质器件电解水制氢研究*

聚焦固体电解质电化学器件电解水制氢中的关键科学难题与技术挑战，研制与固体电解质匹配的高活性、高稳定性电化学析氢及析氧催化材料，发展高效稳定电化学三相反应界面的气体扩散电极及膜电极制备技术，发展气体扩散电极/固体电解质电化学界面微观结构和动态演化的高分辨原位表征技术，发展高强度、耐腐蚀的双极板/集流体制备加工工艺，装配高性能固体电解质电化学器件与系统，实现大电流密度(≥ 1 A/cm²)电解水制氢过程。

4.3 原子结构精确的新一代低铂燃料电池催化剂研究

面向电催化剂中贵金属的高效利用和替代，发展高效亚纳米和原子尺度低铂催化剂创制的新方法，研发面向高/低温燃料电池膜电极所用的低铂或非铂氧还原催化剂；建立催化剂表面原子的电子结构与催化活性的构效规律，阐述在实际工况下催化活性和稳定性的机制；研制出低成本、兼具高活性和长循环的高性能、低成本燃料电池氧还原催化剂，并开发低铂膜电极。膜电极在 0.9 V 电压下氧还原质量活性高于 0.44 A/mgPt,

阴极铂负载量 0.10 mg/cm^2 ，膜电极在氢空 1.5bar 背压下的最大功率密度超过 1.0 W/cm^2 。

4.4 甲醇和含能分子现场催化制氢研究*

发展高效稳定的稀土基甲醇等含能分子催化制氢催化剂的精准制备，充分降低制氢的反应温度并提高其产氢效率，产生氢气纯度 $>99.9\%$ ；深入探究催化制氢催化剂的活性位点的构效关系，从稀土元素独特的电子构象深入理解此类催化剂的“结构-性质”关系。

5. 化石资源转化的催化科学

5.1 基于分子炼油的关键催化材料及催化过程研究

基于原油的分子组成精准分析，以石油炼制产品碳氢分布最优调控为目标，发展石油精准炼制催化新材料和新技术。研究催化剂酸中心调控及多功能催化协同、孔道修饰及多级孔构建等机制，发展烃裂解深度可控的催化新材料、稠环可控加氢开环的重油加氢裂化催化材料；研究烃催化转化过程中反应分区调控机制，开发重质油高效转化、油品升级及多产基本有机化学品的工业催化新技术，目标产品收率较当前最高水平提升 15% 以上。

5.2 烃类高效脱氢催化剂设计及新工艺研究

针对烷烃高效脱氢过程中的高温能耗大、低温效率和选择性差的问题，研究碳氢键活化机制，探索硼化物、非铬金属氧化物等新催化体系，发展新型绿色高效低碳烷烃的脱氢催化材料及工艺，实现催化性能接近当前工业铬系或铂系催化剂水平；

发展基于化学链循环的低碳烷烃脱氢制烯烃催化体系，解决载氧体稳定性和化学链流程技术等难题，实现丙烷脱氢制丙烯收率不低于 30%、选择性不低于 90%。

5.3 基于分子氧活化的烯烃环氧化催化研究

以烯烃绿色环氧化为目标，研究分子氧活化、烃的选择氧化机制，创新分子氧活化-环氧化过程耦合概念，研制烯烃环氧化催化新材料及新过程。开发以有机过氧化物为氧化剂的丙烯环氧化新过程，丙烯转化率和环氧丙烷选择性均达 99%以上；创制多功能催化材料复合体系，实现丙烯-氧气/氢气直接选择氧化制环氧丙烷高效催化体系；发展具有构型选择性的氯丙烯、环状烯烃等双氧水环氧化高效催化材料。

6. 环境友好与碳循环的催化科学

6.1 CO₂ 电解制液体燃料与化学品研究*

针对 CO₂ 电催化还原产物选择性、生成速率、能量效率与稳定性不足的挑战，发展高效 CO₂ 电还原催化材料和基于膜电极的 CO₂ 电解器件系统集成技术，提高乙烯、乙醇等产物选择性，探索气体扩散电极内部传质规律以提高其结构稳定性，开展电解器件内部物料传输、反应压力与水热管理研究，实现在大电流密度下 ($\geq 500 \text{ mA/cm}^2$) CO₂ 电解系统高效稳定运行。

6.2 基于超分子调控的高分子聚合催化研究*

发展分子催化与超分子催化的集成技术，构建新型超分子单体、超分子引发剂、超分子催化剂以及超分子调控试剂等。

开拓超分子催化剂辅助的可控/活性聚合新方法，实现对分子量、序列、构型可控的精密功能高分子的制备，解决传统聚合方法环境欠友好的相关难题。

6.3 可循环高分子合成与废弃塑料回收催化体系的研究*

发展催化聚合和废弃塑料降解回收的新催化体系、新策略、新理念和新方法，实现结构可控聚合物的创制和废弃塑料的化学回收利用，实现高分子化学理论的新突破；发展新型聚合反应与过程，创制新型可循环高分子材料，实现可再生单体的精准聚合和单体高效回收，通过高分子物理和加工应用研究，实现创制、应用和循环回收。

6.4 氯乙烯合成绿色无汞催化剂研究

开发乙炔氯化反应合成氯乙烯的无汞催化剂。发展非贵金属催化剂体系，提高现有非贵金属催化剂活性、选择性。阐明催化剂详细反应路径和失活机理，并提出可行的催化剂再生和循环使用方案。开辟 PVC 无汞生产新途径，实现催化剂生产过程低成本、绿色环保、可再生。实现乙炔单程转化率大于 98%、氯乙烯选择性大于 99.5%、稳定运行大于 1000 小时。

7. 青年科学家项目

7.1 水和生物质光、电重整制备高附加值化学品、燃料和氢气

探索面向光、电催化制氢技术的新型阳极替代反应，创制生物质等可再生碳基资源分子转化的新催化剂和新反应过程，揭示 C-C 和 C-H 等化学键选择性活化的规律，实现水和生物

质等可再生碳基资源分子光、电重整制备高值化学品、燃料和氢气。

7.2 高温电催化体系探索

基于高温下反应分子易活化、电化学超电势低与反应速率快的优势，探索气/固界面上水、二氧化碳或甲烷等小分子转化的高温电催化体系；组装高温电化学器件，解析电极基元反应过程，阐明高温电催化反应机理。

7.3 酶-金属协同催化体系研究

针对化学工业对催化剂在温和条件下兼具高效率和高选择性的需求，利用酶-金属协同催化实现单一酶催化或者金属催化难以驱动的重要反应，突破酶催化剂改造的生物学方法，探索面向高效不对称合成的酶-金属协同催化新理论和新机制。

7.4 非贵金属电催化氢氧化催化剂研究

发展应用于碱性膜燃料电池的阳极非贵金属氢气氧化反应催化剂，揭示碱性条件下氢气氧化反应的催化机理，获得描述材料结果与电催化性能之间的构效关系，实现在不使用贵金属的情况下的氢气氧化的高效催化反应，为降低燃料电池成本提供新思路和新策略。

7.5 海水制氢催化研究

发展高效和高稳定性的直接海水制氢技术，重点进行高选择性催化材料的合理设计与制备，抑制卤素阴离子及其他无机离子的竞争反应，实现产氢和抑氯的高选择性催化转化。研究和揭示催化剂的产氢和抑氯机理和催化剂稳定性增强机制，实

现海水高效稳定制取氢燃料(过电位 $<200\text{ mV}$, 电流 $>1\text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$)。

7.6 电催化高效合成氨探索

针对传统合成氨高能耗的问题, 开发系列单原子、团簇、纳米等多尺度催化剂, 探索高效电催化活化氮气制氨, 并揭示电催化活化氮气过程的反应机理。

7.7 机械催化新概念和新方法探索

探索机械作用引起的介质极化导致的新颖催化理论和应用、研究相关过程中液体-固体界面电子转移和能量传递的规律, 及物理化学本质, 实现能源转化和环境保护相关重要过程的高效催化反应。