



编者按

面对我国能源供给紧张与高排放高污染的“双重压力”，国家自然科学基金委员会于 2016 年启动了国家自然科学基金

金重大研究计划“碳基能源转化利用的催化科学”。历经 8 年，中国科学家通过多学科交叉融合，在催化表界面基础研究、新

型催化剂和催化过程的研发等方面形成了特色，显著提升了我国在催化领域的竞争力。

八年，他们给碳基能源带来一场“绿色革命”

——记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”

■本报记者 孙丹宇

从点亮第一盏电灯到驱动高铁飞驰，碳基能源这个听起来陌生的词语，早已如同现代社会的“血液”，深深融入人们日常生活的方方面面。碳基能源以煤、石油、天然气等化石燃料为能量载体，通过燃烧和催化转化等方式释放能量，为现代社会提供持续不断的动力支持。

然而，在我国能源结构中仍占据主导地位的化石燃料，其燃烧产生能量的过程中不仅释放一些对环境有害的物质，造成环境污染，同时还排放大量被认为是温室气体的二氧化碳，导致我国面临能源供给紧张与高排放高污染的“双重压力”。

如何实现碳基能源高效转化和清洁利用，保证国家能源安全，已成为我国在能源领域亟须应对的一个重大战略挑战。

面对上述问题，国家自然科学基金委员会（以下简称自然科学基金委）提前布局，于 2016 年适时启动了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”（以下简称重大研究计划）。重大研究计划由中国科学院院士、中国科学院大连化学物理研究所研究员包信和领衔，聚焦于碳基能源小分子高效催化转化这一核心科学问题，经过 8 年多的持续攻关，在催化表界面基础科学问题的认知、先进催化表征技术和方法的发展、催化反应新过程的创新和产业化开发等各个层面都取得了重大突破，初步形成了“纳米限域催化”等具有原创性的学术思想，提出包括 OXZEO 双功能催化剂和接力催化在内的多个创新催化剂和催化反应过程，显著提升了我国在催化领域的竞争力。

近期，重大研究计划顺利完成结题评估。“我们通过化学、化工、数理、材料等多学科交叉融合，已在与催化相关的基础理论和实验研究上取得一些有意义的创新成果，充分发挥和放大了我国在催化和表界面研究领域的优势，在催化表界面基础研究，以及新型催化剂和催化过程的研发等方面形成了特色，在国际上产生了较大影响。”包信和说。

来自远古时代的能源

人类社会的发展史，就是一部碳基能源的利用史和能源技术的发展史。

早在远古时代，人类用薪柴点燃了第一代碳基能源应用的文明火种。工业革命时代蒸汽机的轰鸣，开启了煤炭驱动的新纪元，铁轨纵横交错，钢水奔流不息。石油和天然气的发现，特别是内燃机的发明，同时带动了汽车、航空、航海和系列重工业的迅猛发展，逐步形成了以化石能源为主的现代能源体系。

统计数据 displays，2022 年全球一次能源消费中，化石燃料的占比达到了 82%，其中煤炭 27%、石油 31%、天然气 24%。然而，化石能源驱动的工业进程也带来了严重的环境问题——由其支撑的工业活动贡献了全球温室气体排放的 80% 以上。

我国资源禀赋呈现“贫油、少气、相对富



包信和(左二)和团队成员。

受访者供图

煤”的特点，而伴随着经济的迅速发展，能源供给总体不足、液体燃料短缺等问题日益凸显，同时二氧化碳排放、环境污染等压力也日渐增大。包信和介绍：“在这种情况下，如何保障国家能源安全，实现国民经济高效绿色发展，就成为一项重大的国家需求。”

2010 年的一次研讨会后，时任自然科学基金委化学科学部副主任陈拥军找到包信和，谈起与能源相关的表界面研究。“表界面是由一个相过渡到另一个相的交界区域，是相邻两相物质接触的分界面，相较于任何一个纯相，其结构、电子特性，以及物理化学性能都有很新颖的特性。其应用领域不仅包括催化，还包括电化学、生物、材料、器件等，是化解能源危机的‘法宝’。”包信和告诉《中国科学报》，“所以我们希望从表界面研究入手，以催化科学为主攻方向，启动一个新的重大研究计划，为解决能源问题贡献催化的力量。”

为此，包信和等专家多次在全国不同城市召集组织不同方向的催化学者，开展学术研讨、进行方案论证。然而，在第一年申报时却出现了意外，当团队准备好材料提交申请并向自然科学基金委聘请的多学科专家进行答辩时，评审专家却指出研究范围过于宽泛，核心目标不够聚焦。

“这促使我们重新梳理思路，考虑‘收缩战线’。”中国科学院大连化学物理研究所研究员、重大研究计划项目秘书傅强回顾说，“我们反复凝练科学目标，锁定核心科学问题，最终将研究主题重新锚定在最初的起点——碳基能源的表界面研究，将力量聚集到破解碳基能源高效催化转化的奥秘上。”

傅强进一步说：“我们聚焦的碳基核心是碳—化学，具体瞄准一氧化碳、二氧化碳、甲烷这

三个关键分子。研究方向因此变得清晰、具体。”

重大研究计划项目组设想通过多学科交叉融合，充分发挥并扩大我国在微纳研究和表界面研究领域的优势，力争在催化表界面基础研究方面形成中国特色，并进一步推动碳基能源的产业革命。

2016 年 1 月，重大研究计划通过充分的专家论证，正式获批启动。

“拧成一股绳”的团队

研究目标一经确定，由包信和、薛其坤、李永旺、谢在库、吴凯、孙世刚、胡培君、徐昕等多位领域内学者组成的专家组，立即行动，顶层设计研究计划、组织研究队伍，布局研究任务和方向。比如，主要成分为一氧化碳和氢气的合成气的高效转化、二氧化碳资源化优化利用、甲烷定向活化等脱颖而出，成为专家组的“宠儿”。

“我们给重大研究计划设立了 3 个阶段：聚焦合成气直接转化，核心是突破传统费托合成工艺的局限，实现大幅节水与降碳；跨越中间步骤，实现甲烷的直接转化；攻克二氧化碳高效转化的难关——通过变革性的高温电化学技术实现‘变废为宝’。”包信和介绍，“现在说二氧化碳转化，大家都会认为很重要，但 10 年前将这个方向作为重点研究还是比较超前的，是要有点胆魄的。”

历经 8 年时间，来自全国 50 多所大学和科研机构的学者参与，总共 115 个项目获得资助，最终取得了一系列重要的研究成果。

重大研究计划围绕合成气直接制备低碳烯烃、芳烃与含氧化合物等重要过程，创制了高活性、高选择性双功能催化剂，其一氧化碳

研究提出合成气直接转化的新概念和新过程

作为连接上游煤炭、天然气和生物质等碳基能源与下游化学品或燃料的关键枢纽，合成气高效定向转化是核心。在重大研究计划资助下，项目团队围绕合成气直接制烯烃、芳烃开展了系统性的研究，揭示了相关催化反应活性与选择性调控原理，开发选择性调控新方法、新策略。

研究围绕合成气直接制备低碳烯烃、芳烃与含氧化合物等重要过程，完善并形成了自主创新的“OXZEO 双功能催化”和“接力催化”概念，系统研究了纳米复合催化剂中金属氧化物表面活性位点及其活化一氧化碳与氢气机制、分子筛孔道和酸性质等对碳—碳偶联及产物选择性调控机制、双功能匹配耦合的作用原理等，从而对碳—氧与氢—氢键活化和碳—碳偶联调控原理有了深入认识。

在上述基础理论的指导下，项目团队研究构筑了多功能催化剂，分别实现合成气经二甲醚和甲醇中间体接力催化制乙酸甲酯、乙酸、乙醇等含两个或两个以上碳原子的含氧化合物，选择性分别达 85%、90% 和 88%，突破现有催化体系的选择性极限。

在上述概念指导下，项目团队多项应用成果进入工业试验阶段。包信和团队与中国工程院院士刘中民团队通力合作，联合陕西延长石油(集团)有限责任公司，建设了国际首套千吨级规模的煤经合成气直接制低碳烯烃全流程工业试验装置，已于 2020 年完成工业全流程试验，验证了技术的可行性和先进性，并通过了中国石化联合会的科技成果鉴定。

项目团队的主要研究骨干、中国科学院大连化学物理研究所研究员潘秀莲兴奋地说：“就在前几天，由这一计划促成的‘合成气直接制烯烃技术’成功通过了由国内头部企业组织的首套工业化示范项目预可行性研究论证。”

科学家开发出选择性甲烷氧化偶联新途径

低碳烯烃如甲烷、乙烷、丙烷等，是天然气、页岩气、可燃冰等石油基能源和化工原料的主要成分，是“后石油时代”最为重要的能源分子之一。其可控活化和定向转化为促进能源结构向低碳、清洁、高效转型升级，以及助力“双碳”目标的达成提供了创新途径。

然而，甲烷极为稳定，极化率低和碳—氢键能高。其可控活化和定向转化被视为催化乃至整个化学领域的“圣杯”，成为科研人员亟待攻克的难题。

其中，甲烷氧化偶联(OCM)可以生成

乙烷、乙烯等双原子碳化合物，是一个得到广泛研究的反应。当前该过程中双原子碳单程收率始终无法突破 30%，因此未能实现工业化。

通常认为，OCM 反应遵循“多相—均相”催化机理，甲烷催化活化生成甲基自由基，而气相中甲基自由基的均相偶联难以通过催化剂进行优化和调控。受热力学驱动，甲基自由基和双原子碳物种倾向于与气相中的氧气反应，生成二氧化碳等完全氧化产物，因此传统 OCM 催化体系存在一个理论双原子碳收率上限，这是制约

可分为高温和低温两种途径。其中，高温途径以固体氧化物或熔盐为电解质，高温条件下有利于碳基小分子活化，但产物种类通常受限。低温途径采用溶液电解质或碱性聚合物电解质，低温条件下催化剂和电解质关键材料选择面广，可以获得种类更为丰富的高值产物，但碳基小分子的活化较难。

在重大研究计划的支持下，研究人员围绕碳基小分子高温和低温电解转化展开研究。高温途径采用固体氧化物电解池(SOEC)，通过氧化还原循环等策略

构建高效稳定的金属/氧化物界面，有效提升二氧化碳还原制备一氧化碳性能。在低温途径方面，研究人员主要采用溶液电解质或聚合物电解质，获得了乙

烯、乙醇、乙酸等丰富产物，探究了溶液电解质中碱金属阳离子促进二氧化碳还原作用机制，发现了电极/聚合物电解质界面可以有效催化二氧化碳还原，打破了电催化二氧化碳还原必须有碱金属阳离子存在的传统认知。

相关研究还提出了“表面化学场耦合催化”科学想法，并以此为基础设计出

兼具离子传导和协同二氧化碳活化双功能离聚物，开发了首例工业级电流密度的二氧化碳—纯水膜电解器制备一氧化碳或乙烯技术，并通过利用自主知识产权的碱性膜电解器，实现了高效的二氧化碳/一氧化碳共电解制备多碳产物。研究还发展了阳极添加氢氧化钾电解液的碱性膜一氧化碳电解器及电堆技术，实现安培级电流密度下一氧化碳高效还原制备双原子碳离子产物。

单程转化率 85%，低碳烯烃选择性达 83%，低碳烯烃收率达 48%，性能达到国际领先水平。在此基础上，他们还建成了合成气转化制高值化学品 OXZEO 和接力催化技术平台，为保持我国在合成气化学领域的国际领先地位作出贡献。国内外先后有 40 多个团队开展 OXZEO 和接力催化的相关研究，形成了一支稳定且在国内外具有重要影响力的合成气化学研究队伍。

在甲烷等低碳烷烃的活化和转化方面，项目团队创新性提出用“分子围栏”策略设计金属/分子筛催化剂，在低温下实现了 17.3% 的甲烷转化率和 92% 的甲醇选择性，并提出一种“反应诱导活性位原位生成”的新策略，形成了具有自主知识产权的全新烷烃直接脱氢技术。在甲烷氧化偶联、甲烷选择性氧化制含氧化合物、丙烷脱氢制丙烯等重要反应中，项目团队实现国际领先的催化反应性能，为在低碳烷烃催化转化领域形成有影响力的“中国学派”奠定了重要基础。

重大研究计划不仅在国内，在国际上也引领了二氧化碳的电化学高效转化，率先探索了高温和低温两条二氧化碳转化途径，并结合电化学原位谱学等手段，探究了溶液电解质中碱金属阳离子促进二氧化碳还原作用机制。重大研究计划还提出“表面化学场耦合催化”的科学想法，并设计出兼具离子传导和协同二氧化碳活化的双功能离聚物，开发了首例工业级电流密度二氧化碳—纯水膜电解器制备一氧化碳或乙烯技术，为二氧化碳资源化利用提供了科学支撑。

“我们能在多个方向布局发展，离不开专家组的顶层设计，更是‘集中力量办大事’的体现，只有凝心聚力、协力攻坚，方能实现关键突破，取得更多研究成果。”包信和感慨道。

“无用之用”的研究

除了上述 3 个方向的研究，重大研究计划还前瞻性地催化新概念探索列为重点突破领域，并取得了系列原创成果。

“我们先是提出了‘限域催化’概念，并不断深化，将研究拓展至二维、界面、活性中心、微环境等相互作用系统，从实验和理论上阐明‘限域’效应的内在机制。‘限域’效应不仅能维持催化体系在反应中的高活性状态，而且还是其实现循环再生的关键所在。基于此，我们发展了更具普适性的‘纳米限域催化’新概念。”傅强介绍。

这一成果获得 2020 年度国家自然科学基金一等奖，其科学价值也获得国内外同行的广泛认可，目前全球已有 20 多个研究团队对其跟进研究。

与此同时，新概念也为工业应用指明了方向。包信和团队联合应用研究团队与企业，成功建成并运行了全球首套千吨级规模的煤经合成气直接制低碳烯烃工业试验装置，验证了

该技术的可行性与先进性。

包信和指出：“我国独特的资源禀赋和坚定不移的可持续发展道路，决定了我们必须牢牢掌握催化科学自主创新的主动权。唯有如此，才能为国家在能源利用、资源优化和环境保护等关键领域的重大需求，持续提供坚实的基础理论支撑与核心关键技术保障。因此，在重大研究计划中，我们把原创概念提出和战略方向引领性研究置于重要位置。”

基于这一理念，重大研究计划成功发展了“OXZEO”催化体系、“接力催化”等新概念。这些成果共同为碳基能源催化科学领域注入了强劲动力，让基础研究更加注重本质，带动了学科新方向的飞速发展。

对于基础研究的深远价值，傅强深有感触：“常言道‘无用之用，方为大用’，有些基础研究成果可能并不能立竿见影投入实际应用，但是从长远来看会影响整个领域的发展轨迹。重大研究计划就给我们提供了一个宝贵机遇，让我们能够安心做基础研究，探索更深层次的规律。”

在重大研究计划的支持下，项目团队培养了一批有创新能力的研究队伍和优秀人才，傅强就是其中之一。

回首 8 年前初入项目团队时的青涩，傅强记忆犹新。他坦言：“那是我第一次参与重大研究计划。记得初次在学术会议上向满座的前辈汇报工作，紧张得手心都有些冒汗。”正是在这个顶尖平台上，他得到了宝贵的历练机会。“我们每次项目汇报都可以自主报名。当时，专家们不断鼓励我们这些年轻人要勇敢展示自己的研究，大胆交流，虚心听取各方建议。”傅强回忆道。

在一次次汇报、讨论与思想碰撞中，傅强迅速成长。他从当初略显拘谨的青年学者，逐步历练为能够独当一面的研究组组长，并成功获得自然科学基金委的青年科学基金项目支持。谈及这段经历，他深有感触：“重大研究计划将志同道合的科研力量汇聚起来。我们在这里凝练方向，汇聚合力，最终办成了许多单打独斗难以完成的大事。这段并肩攻坚的历程，是我科研生涯中极其珍贵的历练。”

在重大研究计划的影响下，项目团队进一步推动设立了“十四五”国家重点研发计划“催化科学”重点专项，形成“原创催化理论，开辟催化科学新方向，发展自主研究方法，催生关键核心技术”的总体目标，在过去 5 年已经取得了丰硕的研究成果。

“催化科学”重点专项仍然由包信和作为专家组组长，专家的班底也是以自然科学基金委的重点研究计划为支撑。“未来，随着人工智能(AI)技术的发展，特别是随着 AI 模型的可靠性、数据的质量和多样性、不同技术的有效整合等问题的解决，催化科学将会更加自动化和智能化，有望推动碳基能源转化的催化科学研究迈上新高度。我们国家在这一全球必争的领域中不能落伍，要力争继续引领。”包信和说。

反应的双原子碳选择性。通过将原位同步辐射光电离质谱、原位透射电镜、X 射线吸收谱等先进表征与理论计算相结合，研究人员证实了甲基自由基在负载型钨酸钠催化剂表面的可控偶联，并确定了钨酸钠团簇为甲基自由基可控表面偶联的活性中心。

SOCM 既是甲烷活化技术的一次重要创新，也是自由基化学的一场革命。它改变了“高温下自由基转化不可控”的传统化学认知，提出了“催化剂表面限域可控自由基转化”的新理论，成为基础研究领域“从 0 到 1”突破的标志性成果。

兼具离子传导和协同二氧化碳活化双功能离聚物，开发了首例工业级电流密度的二氧化碳—纯水膜电解器制备一氧化碳或乙烯技术，并通过利用自主知识产权的碱性膜电解器，实现了高效的二氧化碳/一氧化碳共电解制备多碳产物。研究还发展了阳极添加氢氧化钾电解液的碱性膜一氧化碳电解器及电堆技术，实现安培级电流密度下一氧化碳高效还原制备双原子碳离子产物。

上述研究为二氧化碳资源化利用提供了科学基础支撑和新的技术方案。