

“催化科学”重点专项2025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并精准调控其相关的催化过程，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过程，形成催化研究新范式。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。

2025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、环境友好与碳循环的催化科学等4个重点任务进行部署，拟支持4个项目，安排国拨经费概算0.63亿元。申报单位根据指南支持方向，面向解决重大科学问题和突破关键技术进行设计。项目应整体申报，须覆盖相应指南方向的全部研究内容。项目执行期一般为5年。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家。项目1名负责人，每个课题设1名负责人。

指南方向5支持青年科研人员承担国家科研任务，拟支持6个青年科学家项目，安排国拨经费概算0.1685亿元。青年科学家项目不再下设课题，项目参与单位总数不超过3家。项

1名项目负责人，男性应为38周岁以下（1987年1月1日以后出生），女性应为周岁以下（1985年1月1日以后出生），原则上团队其他参与人员年龄要求同上。

1. 催化基础与前沿交叉

1.1 立体选择性聚合催化新体系

针对立体选择性聚合中催化剂活性低、选择性受限、单体适应性弱等关键科学问题，研制高活性、高选择性的催化剂和催化体系，发展聚合反应立构控制新策略与新机制。开展（非）对映异构混合单体的动力学拆分聚合、异构化聚合、立体嵌段聚合、及原位立体复合研究，催化丙交酯、环氧单体、内酯、（甲基）丙烯酸酯和苯乙烯等廉价大宗单体的立体选择性聚合，精准构筑高立构规整性和手性序列可控的聚合物体系。进一步探索无规高分子立构规整化的催化调控，构建具有动态立构规整度的聚合物体系，为高分子材料的性能优化与可控升级回收提供新路径。

对于手性单体和前手性单体，发展5-8种兼具高活性和高立体选择性的催化新体系，聚合时单体浓度 ≥ 1.0 mol/L，温和条件下聚合反应TON \geq ，TOF ≥ 20000 h⁻¹，单体转化率 \geq ；对于手性单体，实现外消旋单体的高效动力学拆分聚合、（非）对映异构混合单体的立体嵌段聚合，并通过原位立体复合实现性能提升；针对动力学拆分聚合，对映体过量值（ee） $\geq 99\%$ ；针对（非）对映异构混合单体的

异构化聚合，单体的动态动力学原位转化率 \geq ；立体复合聚合物熔点较单一手性聚合物提高 $^{\circ}\text{C}$ 以上；合成4~6种手性和前手性单体的高立构规整性聚合物，实现基于手性单体混合物制备的聚合物立构规整度 $\geq 98\%$ ，基于前手性单体制备的聚合物立构规整度 $\geq 94\%$ ，上述所有制取的聚合物的分子量分布 (D) ≤ 1.20 ，分子量 $\geq 50 \text{ kg/mol}$ 。

15

2. 催化剂创制

2.1 AI驱动的高效低温铁基氨合成催化剂创制

针对铁基氨合成催化剂低温活性差及多组分助剂协同机制不明确等挑战，开发智能化高通量绿氨合成催化剂研发平台，实现从催化剂设计、制备到性能评价的全流程闭环；建立针对合成氨催化剂的全元素机器学习全局势函数模型，围绕铁催化剂配方搜索万种以上材料反应空间；利用动力学蒙特卡洛等先进模拟手段实现跨尺度模拟；依托原位穆斯堡尔谱、吸附实验等多尺度表征技术和DFT计算，构建涵盖电子结构参数、几何特征、活性及稳定性等多模态特征描述符的合成氨催化剂数据库；开发低温低压高活性绿氨合成催化剂，完成吨级催化剂生产放大，为绿氨储氢产业提供技术支撑。

考核目标：构建覆盖电子结构、工艺参数、性能等特征的多维度多模态合成氨数据库；机器学习势函数针对合成氨

反应拟合误差小于5 meV/atom,实现万种以上材料反应空间搜索;开发出一套机器学习赋能的智能化铁基氨合成催化剂制备与催化性能评价系统,实现10000个配方以上的氨合成催化剂筛选;研制低温低压高活性铁基氨合成催化剂,实现吨级催化剂放大,在7.0 MPa, 325~400 °C, ~1500 h⁻¹下,出口氨浓达到18%以上。

18

3. 催化原位动态表征与模拟

3.1 复杂(电)催化体系的新表征方法、新模型和理论

聚焦能源(电)催化反应表界面微观机制以及非平衡态界面水的关键作用,发展高灵敏、高空间分辨的原位/工况谱学表征技术,结合大科学装置和人工智能等,建立跨时空尺度耦合的机器学习模型,构建理论谱学与实验谱学的直接对照框架。从模型单晶到实际纳米催化体系再到工况膜电极体系,原位/工况动态表征表界面催化反应过程和界面水物化特性,研究氢键网络辅助下电子、质子/离子等能量和物质的耦合机制。实现(电)催化界面局域外场埃级别精准测量,实时跟踪界面水及活性中间物种在反应中的结构演变,跨尺度预测界面/水结构与质子传输、催化活性的关系,揭示能源催化反应新机制,为指导开发高活性、高稳定性的催化体系提供新范式。

针对复杂电催化界面体系，建立发展高灵敏、高空间分辨表征技术，观测双电层界面水结构和氧物种等关键中间产物的演变过程，纵向空间分辨率 $<1\text{ nm}$ ；实现在电化学能源器件工况条件下的动态表征，最大电流密度不低于 1 A/cm^2 ，获得 $10\text{ cm}^{-1}\sim 4000\text{ cm}^{-1}$ 的指纹结构信息；发展人工智能加速从头算方法和CPU/GPU异构化智算 workflow，实现十万原子级的复杂电催化界面体系的亚微秒级高效计算，并获得偶极矩、极化率等电子结构关键参数，与实验谱峰频率的偏差不超过5%；理解非平衡态表界面水结构调控机制，揭示其与中间物种、催化性能的内关联。

15

4. 环境友好与碳循环的催化科学

4.1 环境友好催化高效构建碳氟键与含氟碳碳键

针对高效、绿色、温和条件下选择性碳-氟键以及含氟碳-碳键形成过程的独特规律等关键科学问题，发展环境友好新型高活性丰产金属催化体系，利用无机氟盐与价廉易得的含氟资源分子高效构建碳-碳键；深入研究催化转化过程中无机氟盐与含氟资源分子活化转化机制，揭示丰产金属催化过程中碳-碳成键规律，建立碳-碳键选择性构建新模式，2-3个集成电路关键材料、战略金属萃取分离关键材料、高能分子公斤级合成以及F标记影像分子中的应用。

创制不少于5个高效构建碳—
环境友好新型高活性丰产金属催化剂，发展8~10个高
效构建碳—碳键的新方法，建立催化剂结构与
催化性能之间的构效关系；完成3-5个电子级含氟光刻工艺材
料关键分子和1~2个战略金属萃取分离关键含氟材料的公斤
级制备；完成1~2个含氟高能分子的制备；完成1~2个F标记
影像分子的合成。

15

5. 青年科学家项目

5.1 单原子催化多相C-C偶联反应研究

针对二氧化碳催化转化中催化位点原子尺度的精准构
筑和高值化学品的定向合成难题，发展单原子配位结构和电
子自旋态精准调控的合成策略；理性设计和创制原子分散的
单/双位点模型催化剂，研究二氧化碳催化转化相关的C-O键
高效活化和C-C键定向偶联反应机制；依托高能量分辨原位
穆斯堡尔谱、同步辐射光源等表征技术，实现对单原子催化
中心在反应过程中配位结构和电子自旋态的实时追踪和原
位定量探测，阐明工况条件下催化中心的真实结构和动态演
变机制；揭示单原子位点配位结构和电子结构对关键反应中
间体（*CO、*CHO等）的吸附活化机制和对关键偶联中间体
（*CO-CO、*CO-CHO等）的调控机制；明晰单原子催化偶

联反应活性和选择性调控的关键因素，提出在原子水平上指导高效偶联反应催化剂构筑的新理论和新策略。

5

5.2 电化学-微生物耦合催化新体系

创制新型的电化学-微生物耦合催化体系，以辅因子为电子和能量载体，整合电化学催化的反应活性与生物催化的选择性优势。构筑分子基异相电催化体系，基于配位化学原理优化电子转移动力学，通过电解器设计提升传质效率，辅因子的高效还原过程。探索还原态辅因子与微生物细胞内代谢路径的耦合机制，为微生物合成过程提供外源的还原力，替代由碳源底物（例如葡萄糖）代谢所产生的还原力，从而从源头降低二氧化碳排放，并提高目标生物分子（例如含多个手性中心的醇类药物中间体）的合成效率。

5.3 氮气高效活化的电催化碳氮偶联新体系

基于分子轨道调控与界面电场协同作用，实现不饱和碳氢化合物与氮气高效偶联反应，阐明碳氮偶联关键中间体的形成与转化规律，探索常温常压下氮气直接作为氮源的电催化双胺化新方法。构建超临界二氧化碳介质中的电催化碳氮偶联新体系，探究超临界态下氮气活化与碳氮成键强化机制，系统解析超临界体系中质量传递-电荷转移-能量转换的耦合规律，形成高效、绿色的胺类化合物合成关键技术。

5.4 表界面催化体系的跨尺度精准动态模拟

表界面催化体系的跨尺度精准模拟是揭示微观机制与宏观性能构效关系的关键科学问题。突破传统模拟方法的时空分辨率限制，开发高精度电子结构计算与高效动力学模拟策略，构建多（跨）尺度精准模拟平台。通过建立不同时空尺度模型间的精确耦合机制，实现负载型金属纳米催化剂、电催化表界面等典型体系在原位反应条件下，从飞秒级电子转移到秒级结构动态演化及反应行为的全尺度动态追踪，发展全流程跨尺度模拟框架。揭示催化剂动态结构演变与其稳定性、活性及选择性间的定量构效关系，为新型高效催化剂的理性设计提供理论支撑。

5.5 面向有机电化学合成的异相间接电催化剂创制

针对直接有机电化学合成过程中催化剂活性位点浓度受限、传质动力学缓慢、电极表面钝化等问题，以及均相间接电催化剂稳定性差、分离困难等问题，开发新型异相间接电催化剂，实现高附加值有机化学品的高效电化学合成。基于晶态多孔材料设计异相间接电催化剂，通过精确调控催化位点结构和孔道微环境，高选择性催化醇氧化、烯烃环氧化、有机硫化物氧化等重要有机氧化反应；通过原位表征技术深入探究催化剂电子-质子传递机制和固液相界面作用机制；

开发规模化反应器，在高电流密度、低电解质浓度下，实现具有商业化前景的重要化学品公斤级制备。

5.6 热催化分解水制氢催化反应体系开发

针对热催化分解水制氢过程面临高温能耗高、催化剂活性/稳定性不足、反应动力学缓慢等挑战，开发高效催化剂体系、优化反应器设计，突破热力学限制。通过高能输入的催化剂合成技术，获得无序度高的金属化合物催化剂，加速晶格氧的动态迁移与再生；建立催化剂的组分和结构可控合成的普适方法；利用原位表征技术揭示催化剂表面 H_2O 吸附-解离-脱附路径；探索界面工程、缺陷调控、载体-活性组分协同作用机制；建立原位氢氧分离的一体化膜反应器，促进反应平衡快速移动。实现以水为主要原料的高效热催化产氢过程。