

“催化科学”重点专项 2023 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。

2023 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 21 个项目。同时，拟支持 8 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 非周期晶格氧催化反应

研究内容：在原子和纳米尺度上设计和构建金属氧化物物

表面晶格氧的非周期性化学微环境，有效调控晶格氧的催化活性，增强晶格氧活性中心的抗毒化能力及目标产物的选择性，发展在温和反应条件下实现重要能源与环境反应的高效催化体系；针对饱和烷烃惰性 C-H 键活化需要高温、强氧化剂或紫外光的挑战，通过引入高氧化性晶格氧物种，发展甲烷等饱和烷烃高选择性制烯烃、氢气的温和转化路线，探索天然气的低能耗制氢与碳协同转化新原理和新方法。

考核指标：建立金属氧化物晶格氧的活化和催化新规律，发展晶格氧活度的综合评价方法，构建单晶相多金属氧化物（金属种类 ≥ 5 种）复合催化剂，应用于 2-3 类重要的能源与环境低温催化反应体系；在低贵金属含量（ $\leq 0.5\text{wt}\%$ ）和温和反应条件（ $\leq 200\text{ }^{\circ}\text{C}$ ）下，实现催化甲烷等饱和烷烃协同制备烯烃与氢气（烯烃选择性 $\geq 50\%$ ）。

关键词：晶格氧，金属氧化物，氧化脱氢

1.2 超结构仿酶催化剂创制

研究内容：针对有机小分子催化模式少、效率低、工业化应用受限等问题，基于生物酶催化的基本原理，创制具有超越生物酶结构和超越有机小分子催化剂功能的新型仿酶催化剂；以药物活性分子和天然产物关键结构单元构建为目标，开发仿醛缩酶、转氨酶、磷酸化酶和质子化酶等催化新体系，特别是发展挑战性季碳、螺碳和杂原子中心的三维精

准构筑新方法；实现超结构仿酶催化剂应用于重要活性天然产物高效合成重磅药物的规模化制备。

考核指标：创制 4-5 类全新超结构仿酶催化剂，要求原料易得、合成简便和可公斤级规模制备；基于开发的仿酶催化剂，发展 4-5 类经济高效的仿酶催化新反应，催化效率和成本的综合效能不低于相应的酶催化体系；实现若干药物（如索非布韦、氟苯尼考、高三尖杉酯碱等）的公斤级合成。

关键词：仿生催化，化学酶，药物合成，天然产物

1.3 活细胞中的人工催化

研究内容：构建可用于活体环境的人工催化体系，发展干预活细胞生命过程的技术和方法。开发与活体细胞兼容的人工催化体系，实现对活性分子的原位合成、生物大分子功能的实时调控以及生命过程的动态解析；利用人工催化体系，实现描绘生物大分子的分布及生物学事件、持续性原位合成生物活性分子等应用。

考核指标：建立若干（包括金属催化、有机催化、光催化和人工酶催化等）可用于活细胞的新型催化体系；发展 3-5 类利用人工催化体系在活体环境合成和调控活性分子的新方法，开发 3-5 种利用人工催化体系调控和解析活细胞内生物大分子功能和动态分布的化学工具。

关键词：生物正交反应，活细胞人工催化，非天然酶，

活体分子创制

2. 催化剂创制

2.1 单原子催化涉氢反应研究

研究内容：面向精细化学品绿色制造和氢能领域中的涉氢反应，发展单原子配位环境和活性位密度可控的催化材料制备方法；研究单原子配位微环境对金属-载体电子相互作用、氢溢流效应和催化反应活性/选择性的影响和调控规律，阐明涉氢反应过程中的活性位结构和微环境的动态演化机制，认识影响单原子催化剂反应稳定性的关键因素，提出构建兼具高活性/高选择性/高稳定性的单原子催化剂新理论和新策略，并在 1-2 个重要工业应用反应中得到验证。

考核指标：针对 1-2 个具有重要工业应用的加脱氢反应过程，创新 3-5 种单原子催化剂制备方法，在原子和分子尺度获得活性位微环境结构在反应过程中的动态演化规律，实现在典型工业反应条件下的活性/选择性/稳定性等性能优于现有的纳米催化剂体系，节约贵金属资源 20%以上。

关键词：单原子，加脱氢，催化理论，原子经济性

2.2 手性催化剂协同体系研究

研究内容：针对传统单一手性催化剂在底物活化和选择性控制方面的局限，创制金属/金属、金属/有机小分子以及化学/生物催化剂等相互协同的手性催化剂体系，探索新型协

同催化过程中化学键断裂、电子传递以及基团转移的作用新机制，发展单一手性催化剂无法或者难以完成的多样性、发散性和精准性不对称催化高效合成反应，实现上述手性催化剂协同体系在重要药物规模化制备中的应用。

考核指标：创制 3-5 类新型高效的手性催化剂协同体系；发展 6-8 种基础有机分子的多样性、发散性和精准性不对称催化转化新反应；实现贝达喹啉、莫西沙星和青蒿素等重要药物的公斤级合成。

关键词：协同催化，金属催化，有机小分子催化，生物催化

2.3 生物质基平台化合物定向转化的稀土基催化剂

研究内容：设计新型稀土基催化剂（如稀土基合金、稀土基功能载体负载金属催化剂等），发展催化剂精准制备方法；针对生物质基平台化合物定向转化制备化学品等重要反应，聚焦 C-O/C-C 键选择活化等关键科学问题，研究催化剂的结构、亲氧能力和酸碱性等与催化性能之间的关系以及稀土组分的调变作用机制，发展绿色高效的新反应过程；开发高效稳定稀土基催化剂制备的关键技术，为产业化应用提供相关参数。

考核指标：创制 3-5 种高效稳定的稀土基复合催化剂，阐明催化剂构-效关系及稀土组分的调变作用机制，实现葡萄

糖、甘油、山梨醇和呋喃二甲酸等重要平台化合物高效催化转化制备丙二醇、己二醇和己二酸等重要化学品，目标产物收率达到 85%以上。

关键词：生物质平台化合物，二元醇，有机酸，稀土基催化剂，构效关系

3. 催化原位动态表征与模拟

3.1 催化剂理性设计软件的开发

研究内容：采用基于第一性原理和机器学习势函数的理论计算方法，结合高通量计算和人工智能技术，发展高效、系统的多相催化剂原子模拟和多尺度模拟方法，开发相应的计算软件平台；发展多相催化工况下复杂反应网络的构建方法，建立与谱学等实验手段进行验证的接口方案；发展多相催化构效关系的构建方法，建立可以解释并用于关联理论可计算量和实验可观测量的函数模型，形成新一代多相催化剂的理性设计方案；开发具有可拓展性、可与实验软件平台交互的催化剂设计软件平台，开拓知识和数据协同驱动的催化剂智能设计。

考核指标：开发国产电子结构计算软件，实现千个原子以上催化体系在杂化泛函精度下的模拟，实现复杂催化体系的原位动态模拟；开发大规模催化过程计算软件和催化反应数据分析平台，搭建云与超算兼顾的混合云智能算力平台；

建立碳基能源分子催化转化专题数据库，针对 1-2 个重要的碳基能源分子催化转化体系，筛选出 2-3 种新型催化剂，并实现实验验证。

关键词：催化剂构效关系模拟，催化剂设计软件，人工智能，高通量计算

3.2 基于新原理的表界面表征方法

研究内容：发展固液电化学界面工况下催化剂活性位结构动态变化、吸附物种构型演变和能量电荷转移等过程的多尺度（空间与时间）表征新方法；发展表征局域电场对电催化过程速率、选择性和机理的影响以及在工况下对电化学微观反应环境直观、高效动态监测的新方法；针对实际应用中的典型电化学能源器件，发展能够实时监测膜电极的电化学光谱/质谱联用技术。

考核指标：实现对电催化固液界面结构和动态反应过程进行高时间分辨表征，对界面微观反应环境在纳米级空间分辨率上进行可视化实时监测；利用电化学-光谱/质谱联用技术实现对实际工作电化学能源器件进行实时跟踪，最大工作电流不小于 1 A/cm^2 ，对于使用聚合物电解质工况体系不引入液态小分子电解质等干扰因素，金属检出限 0.1 ppb 。

关键词：电催化界面，多尺度表征，动态监测

3.3 光生载流子的迁移和复合动力学

研究内容：针对半导体光催化反应中电荷迁移和复合过程，发展超越经典近似、多自由度耦合的大尺度非绝热动力学方法；搭建时-空协同、高分辨的光谱和成像实验平台；通过理论和实验双向互动，探究非平衡、非绝热和超快的电荷迁移和复合动力学机制；揭示电荷、晶格、轨道、自旋等多自由度耦合对光生电荷迁移和复合动力学的影响规律；阐明界面电荷转移微观机制及光生电荷参与表界面催化反应动力学过程，为研发性能优异的半导体光催化材料提供可靠的理论和实验依据。

考核指标：建立声子模式分辨、电-声耦合、自旋-轨道耦合及外场参与的非绝热动力学模拟方法，开发具有自主知识产权的相关软件；建立 sub-1 ps 和 sub-300 nm 时-空分辨率的瞬态吸收显微学方法，建成紫外-太赫兹波段、fs-ms 时间窗口的光谱仪系统。

关键词：半导体光催化，非绝热动力学，光生电荷迁移，自旋-轨道耦合，瞬态光谱

4. 可再生能源转化与存储的催化科学

4.1 高效稳定光电催化分解水制氢

研究内容：针对太阳能光电催化分解水制氢反应体系效率低和稳定性差等问题，创制新型宽光谱高活性、高稳定性的光电催化光阳极和光阴极体系；阐明影响光电催化分解水

系统寿命的关键因素，揭示表面重构和质子耦合电子转移对光电极稳定性的影响规律，探索提高光电极稳定性的方法，发展催化剂自修复方法，实现高效超长寿命光电催化分解水系统；发展高效稳定的多结耦合光电催化分解水集成体系；开展光电催化分解水制氢的基础研究、器件开发与技术研究；研制无偏压光电催化分解水制氢器件，并研究其在工况运行条件下的稳定性。

考核指标：在标准太阳光辐照下，太阳能到氢能转化效率 $\geq 5\%$ ，构建无偏压光电催化分解水制氢器件和装置系统，器件光照面积 $\geq 25 \text{ cm}^2$ ，工况条件下器件稳定运行超过 500 h；构建多结耦合光电催化分解水制氢体系和器件，太阳能到氢能转化效率 $\geq 10\%$ ，器件光照面积 $\geq 100 \text{ cm}^2$ ，工况条件下器件稳定运行超过 1000 h。

关键词：光电催化，分解水，制氢器件

4.2 光电催化地球丰量小分子耦合有机底物的资源化转化研究

研究内容：利用太阳能、电能等可再生资源，将 H_2O 、 CO_2 、 N_2 和 SO_2 等自然界储量丰富的小分子通过与有机底物耦合的形式进行资源转化。针对光电催化小分子直接制能源分子及化学品过程中选择性差、种类有限、分离困难等挑战，研究 H_2O 、 CO_2 、 N_2 和 SO_2 等分子活化过程中的中间体与有

机底物耦合反应机理和路径，开发具有实际应用价值、高转化率与高选择性的绿色催化合成工艺路线。

考核指标：获得 10 种以上高效光电催化剂，发展 2-3 种 H_2O 、 CO_2 、 N_2 或 SO_2 还原或氧化耦合有机底物的新途径，有机底物转化率及选择性>95%，稳定运行超过 100 h（效率衰减<20%），扣除电化学贡献后光量子效率大于 1.5%。

关键词：光电催化，小分子活化，耦合有机反应

4.3 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 C-O 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，建立催化全过程模拟仿真模型；明确硅、铝和铁等元素的赋存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，在绿氢电耗 $\leq 4.0 \text{ kWh/Nm}^3\text{H}_2$ 下，实现生料自催化分解温度降低 200 °C 以上， CO_2 直接排放减少 95% 以上，自催化产生的 CO 选择性大于 95%，水泥生产过程 CO_2 减排 500 kg/t-熟料。

关键词：碳酸盐，还原炼制，绿氢，水泥，源头减排

4.4 电解水制氢耦合催化选择氧化

研究内容：针对电解水制氢的阳极析氧反应过电位高、产氧价值低的问题，发展与电催化制氢相匹配的高附加值、高选择性电催化阳极氧化反应。通过耦合有机合成、生物质转化等反应，降低电解水过电位，提升产氢效率，揭示阳极选择性氧化反应和阴极制氢反应的协同机制；匹配电解反应器中电解液、隔膜等单元，开发完整的制氢装置。

考核指标：在电流密度 $>1\text{A}/\text{cm}^2$ 条件下，阳极选择性氧化 FE $>90\%$ ，阳极底物转化率 $>85\%$ ，阴极制氢 FE $\geq 99\%$ ，阴极氢气纯度 $>99.9\%$ ；构建电解原型器件和功率 $\geq 10\text{ kW}$ 的装置，能耗 $\leq 4.0\text{ kWh}/\text{Nm}^3\text{H}_2$ ，实测连续运行时间 $\geq 1000\text{ h}$ 。

关键词：电解水，选择氧化，耦合体系

5. 化石资源转化的催化科学

5.1 碳资源高效利用中 C-C 可控偶联催化机制及关键技术

研究内容：面向碳资源高效利用的重要催化过程，针对 C-C 键偶联的活性和选择性调控的关键科学问题，开展基于分子筛等具有孔道限域结构催化材料的可控制备，实现活性位点精准构筑，研究金属或金属氧化物与酸性位的协同作用对 C-C 偶联的调控规律，揭示活性与选择性耦合控制原理并发展高效的解耦方法，从原理上创制高效、稳定的多功能纳

米复合催化剂。

考核指标：针对合成气直接制烯烃、CO₂ 耦合烯烃转化制 BTX 等碳资源高效转化反应，创制 2-4 种高效纳米复合催化剂，形成 C-C 键可控偶联的基础理论；合成气直接制烯烃 CO 转化率和目标产品选择性均>80%；CO₂ 耦合烯烃转化制 BTX 选择性>80%；发展催化剂共性制备技术并应用于重要催化反应。

关键词：碳一转化，孔道限域作用，C-C 键偶联，纳米复合催化剂

5.2 低碳烃的催化羰基化反应研究

研究内容：针对大宗精细化学品和高分子材料单体的合成，发展低碳烃特别是 C₄ 烯烃羰基化制备戊醛、己二醛、己二酸或己二腈等催化羰基化新体系和高效过程。设计合成高效实用的新型配体和金属催化剂，发展调控金属-氢、烷基金属、酰基金属等活性中间体的策略，建立酰基金属试剂的形成、转化及淬灭的选择性控制新模式，实现混合 C₄ 烯烃催化羰基化合成戊醛。

考核指标：发展 3-5 个烃类的羰基化新催化体系；开发 2-3 条农药、精细化学品和高分子材料单体的羰基化合成新技术路线；氢甲酰化反应催化活性 TOF > 4000/h，选择性>95%。

关键词：羰基化，低碳烃，金属催化剂，精细化学品，

高分子材料单体

5.3 渣油直接转化制化工原料新催化体系构建

研究内容：针对渣油低碳绿色转化过程的关键科学问题，发展适合渣油低碳定向转化的催化材料和催化反应体系，建立雏晶分子筛材料的精准合成与结构调控方法，突破现有分子筛合成极限；发展以雏晶分子筛为结构单元的自组装方法，揭示多级结构定向组装规律和机制；阐明渣油大分子定向加氢转化的复杂反应网络和基元反应特征，建立雏晶分子筛结构与催化效能之间的关联，揭示催化反应机理；发展雏晶分子筛规模化制备技术，实现渣油制化工原料高效定向转化。

考核指标：创制 3-5 种渣油直接转化高效催化剂，揭示渣油大分子定向转化反应机理，建立催化剂结构与催化性能之间的构效关系；形成以雏晶分子筛为原料的催化剂规模化制备技术，构建渣油直接转化制化工原料新催化体系；沥青质转化率不低于 80%，胶质转化率不低于 90%，金属（Ni+V）不高于 10ppm，可作为催化裂解原料。

关键词：渣油加氢，雏晶分子筛，定向催化转化

5.4 外场强化作用下高性能分子筛催化材料的调控

研究内容：针对目前分子筛生产过程存在结构调控手段单一、反应周期长、三废排放多的问题，采用外场强化方法，

对分子筛合成过程的混合、传递和晶化过程进行微观强化，建立以外场强化为基础的高性能分子筛绿色合成新方法。研发外场强化技术，揭示外场强化对多相粘性体系的混合—传递—晶化—反应性能的影响规律，实现对分子筛结构和性能的精准调控，形成外场强化的高性能分子筛催化材料绿色合成技术。

考核指标: 开发不少于 3 类外场强化制备分子筛新技术，较传统生产过程晶化时间缩短 20% 以上，模板剂用量降低 20% 以上；高性能分子筛用于生产烯烃和芳烃的反应过程，主产物选择性提高 10% 以上；完成外场强化分子筛合成关键生产过程的放大试验，实现吨级宏量制备。

关键词: 外场强化，分子筛合成，高性能催化材料，烯烃芳烃转化

5.5 强吸/放热催化微区热耦合机制研究

研究内容: 聚焦强吸/放热过程的热耦合效应对反应过程安全与能耗的影响。重点针对低碳烃类加/脱氢等典型强吸/放热反应热与传热的非线性耦合问题，发展研究催化微区反应热和反应进程变化的耦合原位表征技术和多尺度理论分析方法，揭示催化微区反应热与传热的演变规律；明确催化微区结构对强吸/放热反应与传热的作用机制，建立催化剂的热学性质调控策略和工程制备方法；设计匹配热耦合过程的

热交换方式和反应形式，开发绿色能源技术和过程强化手段，实现典型强吸/放热反应系统的节能减排和高效稳定运行。

考核指标：发展 1-2 种反应微区原位热量测量方法和技术，量热精度 ± 100 nW，温度精度 ± 0.1 °C；针对典型强吸/放热反应，建立绿色安全放大实验装置。

关键词：微区反应热，热耦合，多尺度理论分析，过程强化

6. 环境友好与碳循环的催化科学

6.1 绿色溶剂体系构建及其对催化反应的强化研究

研究内容：设计具有不同结构特征的离子液体、水、生物质基溶剂及其构成的混合溶剂体系，研究体系中分子间相互作用和微观结构；设计制备新型催化剂；构建绿色溶剂-催化剂体系，研究绿色溶剂中 CO₂、生物质催化转化制备重要化学品和燃料的反应；研究绿色溶剂对催化剂性能调控作用，以及溶剂与反应物、反应中间体、产物的相互作用对化学反应动力学和热力学性质的影响，揭示绿色溶剂与催化剂协同催化反应的规律和机制、反应的溶剂效应，发展溶剂强化催化反应理论。

考核指标：发展系列绿色溶剂体系，构建绿色溶剂-催化剂耦合体系，获得 CO₂、生物质催化转化制备酸、醇、酚、

酯和烯烃等反应的新路线，在绿色溶剂物理化学性质、绿色溶剂对反应的强化作用及其与催化剂的协同作用规律和机理方面取得新认识。其中电催化 CO_2 还原制 C_2 +醇的法拉第效率 $\geq 85\%$ ，电流密度 $\geq 800 \text{ mA/cm}^2$ ； CO_2 光催化转化制备甲酸的选择性 $\geq 90\%$ ，生成速率 $\geq 100 \text{ mmol/g/h}$ ；木质素制酚类化合物的收率 $\geq 60\%$ ，选择性 $\geq 95\%$ ； CO_2 和低碳醇（甲醇、乙醇）反应制碳酸酯的转化率 $\geq 50\%$ ，产品选择性 $> 90\%$ ，并在百吨级装置上获得验证及应用。

关键词：绿色溶剂，催化反应，溶剂效应

6.2 典型工业烟道气高值化利用关键催化材料及过程强化技术

研究内容：针对煤化工烟道气中碳资源直接转化制备高值化学品，设计高效电、热催化剂，发展烟道气碳资源高值化利用新方法和新路线，研究催化剂种类、烟道气组成与温度等条件对反应的影响规律，及工况条件下催化剂的活性与稳定性；探索催化剂的构效关系和反应机制，揭示催化表/界面反应与传递的耦合及时空动态匹配规律；建立催化剂-介质-反应器跨尺度优化方法和新路线，开发相关技术。

考核指标：获得不少于 10 种高效催化剂以及相关反应路线，建立反应器的跨尺度模型及动态优化方法，揭示工况条件下烟道气催化定向转化机制。建成百吨级烟道气电催化

制 C₂₊化合物的反应装置，并稳定运行超过 1000 h；对于热催化反应，烟道气与富氢弛放气耦合，实现二氧化碳（或一氧化碳）与氢气、烯烃、胺反应制备醇、醛、N,N-二甲基甲酰胺等，选择性>95%，其中至少一种产品在千吨级装置上得到应用，稳定性超过 1000 h。

关键词：烟道气，CO₂，电催化，热催化，C₂₊化学品

6.3 生物质催化转化制航空煤油关键技术研究

研究内容：针对生物质转化制航空煤油设计高效催化体系，研究其对农林生物质催化转化性能以及反应条件对航空煤油收率的影响规律，阐明反应过程中不同碳物种的活化状态及界面催化结构对中间体转变过程的作用机制，建立催化剂规模化制备技术以及反应器跨尺度优化方法，开展全流程系统能量优化与碳传递效率研究；开发具备大规模工业应用前景的生物质催化转化制航空煤油技术。

考核指标：在催化剂组成及结构对反应活性和产物分布影响机制取得新认知，开发不少于 5 种高效催化材料，获得 2-3 种生物质制备航空煤油技术路线；以生物质为原料，获得航空煤油产品碳传递效率不低于 17%；在万吨级生物质制航空煤油装置上得到应用，稳定运行 5000 h 以上。

关键词：生物质，催化剂，航空煤油

7. 青年科学家项目

7.1 过渡金属高熵合金化合物及其电催化研究

针对过渡金属高熵合金催化剂的可控合成及其催化过程的复杂效应仍不明晰等关键科学问题，发展高活性、高稳定性的过渡金属高熵合金电催化剂，用于电催化制备燃料及高附加值化学品。通过理论计算模拟，发展能够高通量筛选过渡金属高熵合金催化剂的方法；建立过渡金属高熵合金催化剂的可控合成的普适方法；研究高熵合金组分及元素比例、表面性质及结构、电解液 pH、电解质浓度等对电催化性质的影响规律和机制；结合理论模型及原位在线技术，研究催化过程中高熵合金催化界面活性位点的动态演变及内在机制；探索高熵合金催化设计、构建和研究的新理论和新方法。

7.2 低温氮氧化物高效脱除催化剂研究

针对现有催化技术对氮氧化物在低温（ $\leq 150\text{ }^{\circ}\text{C}$ ）段无法进行有效脱除的科学难题（科学问题），发展全新的低温氮氧化物高效脱除技术路线（创新性）。创制高存储容量、高存储速率、长寿命的新型氮氧化物存储材料；揭示氮氧化物在催化剂表面的吸脱附机理，研究催化剂活性中心与分子筛等载体表面酸碱性和氧物种的相互作用机理，解析材料的构效关系；探究氮氧化物存储与选择性催化还原耦合反应中的吸脱附动力学与反应动力学的相互作用规律，实现低温氮

氧化物的高效催化脱除。

7.3 生物质平台分子光催化定向合成高附加值含氮化学品

针对生物质平台分子（如甘油、葡萄糖、乳酸等）光催化定向合成在生物医药等领域具有重要价值的含氮化合物，如氨基醇、氨基酸等，发展反应新路线；设计高效光催化剂，研究催化剂结构与性能的关系；揭示光生电子和空穴的协同作用机制，阐明 C-O/C-H 键选择性活化和 C-N 键选择性形成的规律及反应机理。

7.4 稀土基催化剂在能源高效转化中的利用

围绕能源高效转化利用，开发新型稀土基催化剂。聚焦 C-O 键的断裂和 C-C 键的偶联，利用稀土独特的 4f 电子结构、氧化还原性和配位不饱和等特点，精准确定催化转化中关键中间体（*COOH、*CHO 等）的化学信息，探究 CO_x 催化转化制备高品质化学品反应过程，揭示稀土原子在中间体吸附、转化和脱附过程中的重要作用与机制，提高多碳产物的选择性，实现 CO₂ 的绿色、高效转化。

7.5 环境友好储能高分子材料的催化合成

针对目前储能高分子材料难以实现有效的降解回收且电化学性能较差等问题，以大宗工业品为原料，利用惰性键连续催化活化等重要策略，发展烯基及烷基的直接双/多官能

团化新方法，构建新型功能化聚合单体；以获得可降解、可循环的新型功能化高分子为目标，开发功能化单体的催化聚合新体系和新方法，实现催化聚合反应选择性以及立构规整性的精准控制；明确高分子结构与储能、降解等性能的内在联系，为催化合成高性能储能高分子材料提供新思路。

7.6 糖类化合物的精准催化合成研究

均质糖类的规模化获取是限制糖科学乃至整个生命科学研究的重要瓶颈。针对糖类高效催化合成和精准修饰的关键科学问题，研制高活性和高选择性的催化剂和催化体系，实现糖类催化合成中的选择性控制。区别于亲电取代糖苷化方法，开发新型催化糖苷化方法，建立高度模块化的糖类精准催化合成平台；创制高活性高选择性的化学催化和酶催化体系，实现无保护糖的直接催化转化，高效获得糖类药物分子；开辟糖类化合物与多肽、蛋白质及核酸等生物大分子高效精准连接的催化新方法，搭建结构多样的糖蛋白和糖 RNA 的化合物库，并解析糖基化的重要生物学功能，开发糖类药物分子。

7.7 金属中心手性络合物的不对称合成

金属中心手性金属络合物在无机药物化学、发光材料以及催化科学等领域拥有重要的应用价值，但针对此类物质的不对称合成依然存在方法单一、效率低下等问题。研究利用

不对称化学催化与酶催化的方法，进行手性主族金属和过渡金属络合物的高效与精准合成；研究建立不对称配位催化的新概念和新体系，开辟不对称合成化学研究的新方向。

7.8 多相催化自旋选择性加氢反应研究

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界面反应性质，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。