

附件 5

“催化科学”重点专项 2025 年度项目申报指南

“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。项目设 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。项目设 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 40 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

研究内容：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。

考核指标：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，在单体浓度范围为 1.0~10.0 mol/L，催化剂与单体投料比 $\leq 1:1000$ 时，温和条件下聚合反应 $\text{TOF} \geq 30000 \text{ h}^{-1}$ ，单体转化率 $\geq 95\%$ ；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 $\geq 95\%$ ；立体复合聚合物熔点较单一手性聚合物提高 40°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（ $\bar{M}_w/\bar{M}_n$ ） ≤ 1.20 ，分子量 ≥ 50 kg/mol。

关键词：立体选择性聚合，聚合催化剂，原位立体复合，立体嵌段聚合物，混合单体异构化聚合。

经费说明：国拨经费概算参考数约 1500 万元。

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

研究内容：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, 1000~1500 h⁻¹ 下，出口氨浓度达到 18% 以上。

关键词: 合成氨, 催化剂创制, 人工智能驱动, 铁催化剂数据库, 多尺度表征。

经费说明: 国拨经费概算参考数约 1800 万元。

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

研究内容: 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。

考核指标: 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 cm^{-1} - 4000 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、催化性能的内在关联。

关键词：原位/工况表征，电化学界面水，氧物种中间产物，高时空分辨，界面谱学智算。

经费说明：国拨经费概算参考数约 1500 万元。

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

研究内容：针对在高效、绿色、温和条件下选择性构建碳-氟键及含氟碳-碳键过程中所涉及独特规律和关键科学问题，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-氟键与含氟碳-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-氟键与含氟碳-碳键的成键规律，建立碳-氟键与含氟碳-碳键选择性构建新模式，基于自主发展的碳-氟键高效构建方法实现 ^{18}F 标记影像分子的高效合成，同时利用发展的含氟碳碳键构建方法，完成集成电路和战略金属萃取分离关键材料的公斤级合成以及高能分子的高效构筑。

考核指标：创制不少于 5 个高效构建碳-氟键与含氟碳-碳键的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-氟键与含氟碳-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 1~2 个 ^{18}F 标记影像分子的合成；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 个含氟高能分子的克量级制备。

关键词：氟，碳氟键，氟材料，丰产金属，催化。

经费说明：国拨经费概算参考数约 1500 万元。

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。

关键词：单原子催化，穆斯堡尔谱，电子自旋态，C-C 偶联机制，反应路径调控。

经费说明：国拨经费概算参考数约 285 万元。

5.2 辅因子介导的电化学-微生物耦合催化体系研究

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，实现辅因子的高效再

生过程。探索辅因子再生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能量，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，并提高复杂天然产物分子的合成效率。

关键词：分子基异相电催化，电解器设计，辅因子再生与转运，微生物细胞催化，复杂天然产物合成。

经费说明：国拨经费概算参考数约 280 万元。

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。

关键词：氮气活化，电催化，碳氮偶联，偶联活性，反应机制。

经费说明：国拨经费概算参考数约 280 万元。

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。突破表界面催化体系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，实现金属、金属氧化物及负载型催化

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模拟，发展全流程跨尺度精准结构动态模拟框架。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。

关键词：表界面催化，高精度电子结构计算，跨尺度模拟，定量构效关系，催化剂动态结构演变。

经费说明：国拨经费概算参考数约 280 万元。

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。基于结构明确、可调性强的多孔纳米材料设计异相间接电催化剂，通过精确调控催化位点结构及其局域微环境，高选择性（>90%）催化有机硫化物、醇、有机卤代物、烯烃、芳烃等重要反应物的氧化、还原及偶联反应；发展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（>50 mA·cm⁻²）、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。

关键词：间接电催化，多孔纳米材料，电化学合成，高附加值化学品，公斤级制备。

经费说明：国拨经费概算参考数约 280 万元。

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，突破热力学反应平衡限制。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，促进反应平衡向正向移动，提高目标产物收率或降低反应温度。实现以水为主要原料的高效热催化产氢过程。

关键词：催化制氢，水分解，膜反应器，氢氧分离，原位表征。

经费说明：国拨经费概算参考数约 280 万元。

“催化科学”重点专项 2025 年度项目申报指南

形式审查条件要求

申报项目须符合以下形式审查条件要求。

1. 推荐程序和填写要求

- (1) 由指南规定的推荐单位在规定时间内出具推荐函。
- (2) 申报单位同一项目须通过单个推荐单位申报，不得多头申报和重复申报。
- (3) 项目申报书内容与申报的指南方向相符。
- (4) 项目申报书及附件按格式要求填写完整。

2. 申报单位应具备的资格条件

- (1) 申报本次重点专项的项目（课题）牵头单位和参与单位应为中国大陆境内注册的科研院所、高等学校和企业等（以下简称内地单位），或由内地与香港、内地与澳门协商确定的港澳地区单位（以下简称港澳单位）。内地单位应具有独立法人资格，注册时间为 2024 年 6 月 30 日前。
- (2) 牵头单位和参与单位应具有较强的科技研发能力和条件，运行管理规范。
- (3) 中央和地方各级国家机关不得作为牵头单位或参与单位。
- (4) 牵头单位和参与单位无在惩戒执行期内的科研严重失信行为记录和相关社会领域信用“黑名单”记录。

3. 项目（课题）负责人和参与者应具备的资格条件

- (1) 项目（课题）负责人应具有高级职称或博士学位，每

年用于项目的工作时间不得少于 6 个月。

(2) 常规项目(课题)负责人应为 60 周岁以下(1965 年 1 月 1 日以后出生)。

(3) 青年科学家项目负责人应具有高级职称或博士学位,男性应为 38 周岁以下(1987 年 1 月 1 日以后出生),女性应为 40 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。

(4) 港澳单位的项目(课题)负责人和参与者应遵守《中华人民共和国香港特别行政区基本法》《中华人民共和国澳门特别行政区基本法》和国家重点研发计划管理的相关规定,爱国爱港、爱国爱澳。

(5) 项目(课题)负责人应为对应项目(课题)主体研究思路的提出者和实际主持研究的科研人员。

(6) 中央和地方各级国家机关的公务人员及港澳特别行政区的公务人员(包括行使科技计划管理职能的其他人员)不得牵头或参与申报项目(课题)。

(7) 参与重点专项实施方案或本年度项目指南编制的专家,原则上不得牵头或参与申报该重点专项项目(课题)。

(8) 项目(课题)负责人和参与者无在惩戒执行期内的科研严重失信行为记录和相关社会领域信用“黑名单”记录。

(9) 申报项目受理后,原则上不能更改申报单位和负责人。

(10) 项目(课题)负责人和参与者满足限项申报要求。

4. 本重点专项指南规定的其他形式审查条件要求

项目须覆盖相应指南方向的全部研究内容,实施周期一般为

5 年。项目下设课题数不超过 4 个，参与单位总数不超过 6 家。
常规项目设 1 名项目负责人，项目中每个课题设 1 名课题负责人。

青年科学家项目不下设课题，原则上不再组织预算评估，项目设 1 名负责人，参与单位总数不超过 3 家。

本专项形式审查责任人：李丹（联系电话：010-68104776）

浙江大学 zhujinjing