

提名国家自然科学奖一等奖

公示材料

一、项目名称：纳米限域催化

二、提名者：中国科学院

三、提名意见：

该项目针对制约国民经济发展的能源高效转化和多相催化基础领域中的重大科学问题，从纳米体系的结构特征和基本原理出发，以催化反应选择性调控为目标，在国际上率先提出纳米空间（如碳纳米管等）“狭义限域”催化新概念，在系列重要催化过程中得到充分验证和完善；在大量理论和实验研究的基础上，进一步将概念拓展到界面、晶格等“广义限域”体系，形成具有普适性的“纳米限域催化”基础理论，揭示了限域增强配位不饱和和活性中心的催化本质，得到同行的高度认可，获得多项重要国际奖励。在该理论的指导下，设计并研制了金属和氧化物界面稳定的配位不饱和亚铁活性中心，实现了温和条件下大量 H_2 中微量 CO 的 100% 选择性去除，成功解决了氢氧 PEM 燃料电池中杂质 CO 毒化贵金属催化剂的难题；进一步将部分还原的复合氧化物界面限域的配位不饱和和活性中心定向活化 CO 反应，与分子筛纳米孔道限域的碳-碳择形偶联等多个催化过程耦合，创制了 OX-ZEO® 双功能催化体系，成功实现了煤基合成气一步直接转化制高值化学品（如乙烯、丙烯等），从原理上颠覆了统治煤化工领域近百年的传统费托（FT）过程，被国内外同行誉为该领域中一个里程碑式的研究进展，引领了 C1 能源分子转化科学领域的发展。工业性试验进一步验证了该项原创性成果从科学发现转变为实用技术的可行性，为构建具有中国特色的贫水条件煤转化新平台奠定了坚实基础。

对照国家自然科学奖授奖条件，提名该项目为国家自然科学一等奖。

四、项目简介：

催化化学涉及能源、材料、环境、制药等领域，贡献了世界 GDP 的 20% 以上。150 多年来，催化科学的基础研究已经取得一系列重要成果，建立了以“表面吸附”、“活化能调控”、“活性中心”等为代表的催化基础概念，实现了合成氨、聚烯烃和石油精加工等工业催化体系。然而，迄今为此，对催化作用的本质即活性中心的形成和稳定机制、反应选择性控制原理的认识长期停滞，制约了基础理论的进一步发展，严重阻碍了当今资源优化利用和社会可持续发展背景下高效低排放催化剂的创制。

本成果以认识催化活性中心的形成和稳定机制为核心，提出了“纳米限域催化”的基础概念，取得了如下三项科学发现：

发现一、提出碳纳米管限域催化的概念—纳米空间的“狭义限域”。基于碳纳米管管腔及其独特的电子限域环境引起的化学修饰，导致限域体系中各自性质改变甚至新性质产生的特性，提出碳纳米管限域催化概念，并在系列催化反应得到实验验证，据此创制 RhMn 限域催化剂，实现合成气直接转化制乙醇等碳二含氧化物[*Nat.Mater.*2007]。荷兰科学院院士 van Santen 教授及合作者称赞为“开创性工作”。

发现二、提出界面限域催化的概念—界面等“广义限域”。从原子层面上阐明了表面配位不饱和活性中心的生成机理，认识到源于金属与氧化物界面价电子转移的限域效应对活性中心的增强和稳定机制。利用界面配位不饱和 Fe 中心对氧分子的选择吸附和解离特性，创制出 Pt-FeO 催化剂，实现了室温条件下氢气中微量 CO 的 100% 去除，成功解决了长期困扰氢氧燃料电池中微量 CO 导致铂催化剂中毒并失活的难题 [*Science*, 2010]。

发现三、耦合界面限域氧化物和空间限域分子筛实现合成气直接制低碳烯烃 OX-ZEO 新过程。利用复合氧化物 (ZnO/CrO_x) 构成的配位不饱和界面，实现 CO 分子的选择活化和高效歧化 ($2\text{CO} \rightarrow \text{C} + \text{CO}_2$)，与具有择形特性的分子筛耦合，创制出 OX-ZEO® 催化剂，催化煤基合成气 (CO/H₂) 直接转化制低碳烯烃，选择性高达 80% [*Science* 2016]，同时反应过程摒弃了水循环。这一发现彻底颠覆了统治煤化工领域九十多年的传统费托过程，开创了煤转化向高定向、低水耗发展的新时代，被誉为煤化工领域一个里程碑式的重要突破，是面向国民经济重大需求的源头科学创新，被评为 2016 年度“中国科学十大进展”；最近工业中试试验的成功完成进一步验证了该项科学发现转变为技术的可行性。

本成果由国际上率先提出的“碳纳米管限域催化”新概念，逐步从孔道的“狭义限域”拓展到具有普适意义的界面“广义限域”催化，形成比较完整的“纳米限域催化”的基础概念[NRS]。这一成果得到同行的高度评价和认可，包信和被授予德国催化协会杰出成就奖 (Alwin Mittasch 奖)，团队获首届全国创新争先奖牌 (2017) 等。完成人多次应邀在国际重要的学术会议上做大会报告和主题报告，如索维尔化学大会 (Solvay Conference on Chemistry)、高登会议 (Gordon Research Conference)、国际分子筛大会等。

五、代表性论文专著目录:

序号	论文专著 名称/刊名 /作者	年卷页码 (xx年xx卷 xx页)	发表时 间(年 月日)	通讯作 者(含 共同)	第一作 者(含 共同)
1	Interface-Confined Ferrous Centers for Catalytic Oxidation/Science/ 傅强, 李微雪, 姚运喜, 刘洪阳, 苏海燕, 马丁, 顾向奎, 王珍, 张辉, 王兵, 包信和	2010年328卷 141-1144页	2010 年05 月28 日	包信和	傅强, 李微雪
2	Synergetic effect of surface and subsurface Ni species at Pt-Ni bimetallic catalysts for CO oxidation/ J. Am. Chem. Soc. / 慕仁涛, 傅强, 徐红, 张辉, 黄宇营, 姜政, 张硕, 谭大力, 包信和	2011年133卷 1978-1986页	2011 年02 月16 日	傅强, 包信和	慕仁涛
3	Selective conversion of syngas to light olefins/ Science/ 焦峰, 李津京, 潘秀莲, 肖建平, 李昊博, 马昊, 魏明明, 潘洋, 周忠岳, 李名润, 苗澍, 李健, 朱义峰, 肖栋, 贺婷, 杨俊豪, 齐飞, 傅强, 包信和	2016年351卷 1065-1068页	2016 年03 月04 日	潘秀 莲, 包 信和	焦峰, 李津 京, 潘 秀莲
4	Understanding nano effects in catalysis / Natl. Sci. Rev. / 杨帆, 邓德会, 潘秀莲, 傅强, 包信和	2015年2卷 183-201页	2015 年05 月11 日	包信和	杨帆
5	Effect of the confinement in carbon nanotubes on the activity of Fischer-Tropsch iron catalyst/ J. Am. Chem. Soc. / 陈为, 范中丽, 潘秀莲, 包信和	2008年130卷 9414- 9419页	2008 年07 月23 日	潘秀 莲, 包 信和	陈为
6	Iron Encapsulated within Pod-like Carbon Nanotubes for Oxygen Reduction Reaction/ ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION/邓德会, 于良, 陈晓琪, 汪国雄, 金立, 潘秀莲, 邓澆, 孙公权, 包信和	2013年52卷1 期371-375页	2012 年12 月6日	潘秀 莲, 包 信和	邓德会
7	Enhanced ethanol production inside carbon-nanotube reactors containing catalytic particles/Nature Materials/ 潘秀莲, 范中丽, 陈为, 丁云杰, 罗洪元, 包信和	2007年6卷7 期507-511页	2007 年5月 21日	包信和	潘秀莲
8	The Effects of Confinement inside Carbon Nanotubes on Catalysis/ ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH/潘秀莲, 包信和	2011年44卷8 期553-562页	2011 年6月 27日	潘秀 莲, 包 信和	潘秀莲

六、主要完成人（完成单位）：

排名	姓名	完成单位	工作单位
1	包信和	中国科学院大连化学物理研究所	中国科学技术大学（2017-）
2	潘秀莲	中国科学院大连化学物理研究所	中国科学院大连化学物理研究所
3	傅强	中国科学院大连化学物理研究所	中国科学院大连化学物理研究所
4	邓德会	中国科学院大连化学物理研究所	中国科学院大连化学物理研究所