

能源催化转化全国重点实验室工作简报

< 2026 年 09 月 >

能源催化转化全国重点实验室编

2026 年 09 月 30 日

研究进展

我室构建分子级交联复合膜新结构实现气体分离性能智能切换..... 01

我所揭示 NiO/Al₂O₃ 表面原位重构活性位点
驱动甲烷部分氧化制合成气..... 02

我室提出动态氧空位工程策略实现高效稳定酸性水氧化反应..... 04

我室揭示氧化锰表面羟基和氧空位增强一氧化碳吸附的协同机制..... 05

我室 250 千瓦级海水制氢联产淡水系统实现高效稳定运行..... 06

新闻动态

道达尔能源中国区副总裁兼科技代表王鹏一行来我室交流访问..... 09

“第二届工业电化学技术交流会暨第十九届有机电化学与
工业学术会议”在我所顺利举办..... 10

队伍建设

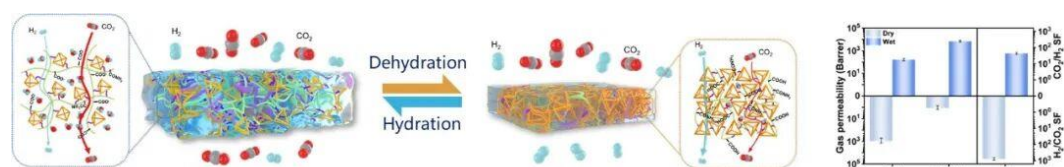
我室张国辉、胡景庭被聘为“特聘研究员” 12

研究进展

我室构建分子级交联复合膜新结构实现气体分离性能智能切换

近日，我室无机膜与催化新材料研究组（504 组）杨维慎研究员和彭媛研究员等，在膜法智能化分离研究领域取得新进展。团队利用零维金属—有机分子笼与水凝胶，构建了分子级交联复合网络，实现了功能材料诱导的分离性能快速、可逆切换，为开发应对复杂分离工况场景需求的一体多功能膜材料及分离膜智能化迭代提供了新思路。

对于氢气制取及合成气生产而言，开发从含氢气体混合物中高效捕集二氧化碳的低能耗分离技术具有重要意义。膜分离是一种高效、低能耗的先进分离技术。由于不同工况下氢气（ H_2 ）与二氧化碳（ CO_2 ）的浓度比例存在差异，优先分离混合气中的低浓度组分可减少过程工艺损耗，降低系统能耗。针对该分离体系，传统膜材料通常只能选择分离扩散速率更快的小分子 H_2 或优先分离吸附更强的 CO_2 分子。两种分离效果依赖于截然不同的分离机制，难以通过一种膜材料兼得。



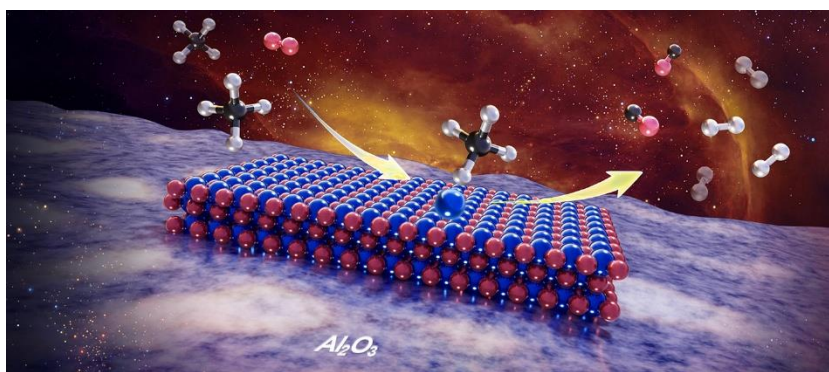
针对上述应用需求和关键挑战，团队在前期研究（*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022; *Adv. Funct. Mater.*, 2024; *Natl. Sci. Rev.*, 2025）的基础上，提出了一种“自下而上”的分子级共混策略，将具有 H_2 筛分孔窗结构的零维金属—有机分子筛笼均匀、高负载交联于水凝胶骨架中，得到了具有优异成膜性、无相间缺陷的新型复合膜材料。研究表明，膜结构中的零维金属—有机分子筛笼以类似“铆钉”的作用，强化了水凝胶中的氢键网络，该网络能够识别并转移 CO_2 分子。当膜结构受外部环境刺激脱水时，水凝胶中的氢键网络断裂，同时自由空间体积收缩，驱动骨架上共价交联的金属—有机分子筛笼紧密重排，有序暴露高密度 H_2 筛分孔窗，诱导分离机制由水凝胶氢键网络主导的 CO_2 促进传递机制切换为由分子筛阵列主导的尺寸筛分机制，小分子 H_2 转而优先渗透过膜， H_2/CO_2 分离因子达 798。实验结果进一步证实，两种分离功能可通过外部 pH 刺激执行快速、可逆切换。此外，该种膜材料具有独特的自修复能力，可在 5 分钟内实现受损结构复原。该制备策略指导下的膜结构易于放大，气体分离性能和分离功能响应式切换特性可放大至 361 cm² 的大尺寸膜材料。

相关研究结果以“Stimuli-Responsive Metal-Organic Polyhedra-Based Hydrogel Membrane for Switchable Separations towards CO_2/H_2 ”为题，发表在《科学进展》

(*Science Advances*) 上。该工作第一作者是 504 组博士研究生李昆。上述工作得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金、中国科学院青促会、辽宁滨海实验室、榆林中科洁净能源创新研究院等项目的支持。(文/图 彭媛、李昆)

文章链接: <https://www.science.org/doi/10.1126/sciadv.aef4345>

我所揭示 NiO/Al₂O₃ 表面原位重构活性位点驱动 甲烷部分氧化制合成气

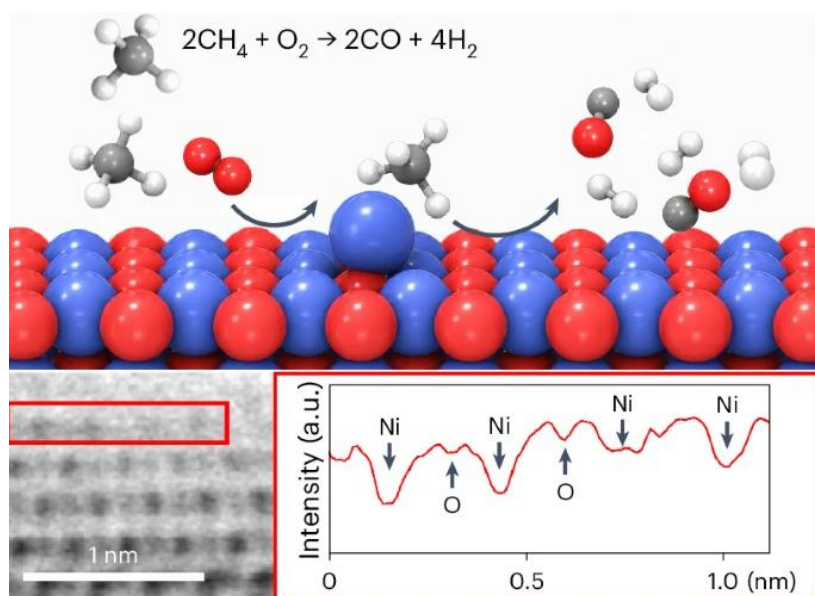


近日, 我所催化与新材料研究中心(1500 组群) 张涛院士、王爱琴研究员、刘晓艳研究员, 联合我室刘伟研究员、西安交通大学杨涛教授、卡迪夫大学 Graham J. Hutchings 教授等, 通过原位表征技术与密度泛函理论(DFT) 计算, 发现在甲烷部分氧化(POM) 制合成气的高温反应环境中, 氧化镍(NiO) 表面可原位重构并生成特定的活性位点。

POM 反应是合成气生产的重要潜在工业路线之一。长期以来, 金属镍纳米颗粒被普遍认为是 POM 反应的催化活性中心, 而反应后检测到的金属镍(Ni) 可能仅由合成气在高温条件下还原生成, 并非本征活性物种。在高温氧化还原气氛中, Ni 颗粒会经历动态的价态与结构重构过程, 该演变历程此前尚未得到完整解析, 导致对真实活性位结构的认知存在局限。

针对上述科学问题, 本工作采用微乳液法制备了低负载量(0.8 wt%) 的镍/氧化铝(Ni/Al₂O₃) 催化剂。该催化剂的甲烷转化率为 92%, 一氧化碳(CO) 与氢气(H₂) 选择性均为 87.0%, H₂/CO 摩尔比稳定维持在约 2.0。值得注意的是, 反应后的催化剂中几乎未检出金属 Ni 物种。其综合性能与浸渍法制备的高负载量(8.0 wt%) Ni/Al₂O₃ 催化剂相当, 更优于同法(浸渍法) 制备的低负载量(0.8 wt%) 参比样, 后者在相同条件下仅表现出甲烷燃烧反应活性。借助准原位 X 射线光电谱(XPS)、原位 X 射线吸收精细结构谱(XAFS) 和原位电子显微

镜等多种表征手段,研究团队发现,反应初期存在的金属 Ni 纳米颗粒在 POM 气氛下迅速氧化转变为 NiO 相;但预先制备的纯相 NiO 催化剂本身并不具备 POM 活性,仅能催化甲烷完全燃烧反应。



通过原子尺度原位电镜表征,本研究进一步捕捉到 NiO(100)表面原位重构形成的 $[\text{Ni}_1\text{O}_1\text{Ni}_4]$ 活性结构单元。DFT 计算进一步揭示,该活性位点对甲烷 C-H 键断裂表现出优异的催化活性,其活化能垒仅为 $12.5 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。该数值不仅远低于 NiO(100)表面的 $38.5 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$,亦低于金属 Ni(111)表面的 $15.7 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$,表明该原位重构所得结构在动力学上具有较好的 C-H 键活化优势。上述实验结果与理论计算相互印证,证实 $[\text{Ni}_1\text{O}_1\text{Ni}_4]$ 结构是驱动 POM 反应的真实活性中心。该研究揭示了 Ni 基 POM 催化剂的活性来源,打破了高效 POM 反应须依赖高负载金属 Ni 纳米颗粒的传统认知,并为其它高温氧化还原催化体系的设计提供了新的理论依据与调控思路。

我所 1500 组群长期致力于多相催化、环境催化及生物质转化领域的研究,在单原子催化方向取得系列进展。近年来,团队在单原子催化硝基苯选择加氢([J. Am. Chem. Soc.](#), 2026)、电催化氧还原([J. Am. Chem. Soc.](#), 2021)和硝酸根还原([J. Am. Chem. Soc.](#), 2022)的活性位识别,以及光热协同催化丙烷燃烧([Angew. Chem. Int. Ed.](#), 2020)、甘油转化([Angew. Chem. Int. Ed.](#), 2024)和丙烷脱氢([Nat. Chem.](#), 2025)等方面均取得阶段性成果。

相关研究成果以“In situ generation of active motifs on Ni/Al₂O₃ during partial oxidation of methane to syngas”为题,发表在《自然—催化》(*Nature Catalysis*)上。上述研究工作得到国家自然科学基金委“单原子催化”基础科学中心项目、国

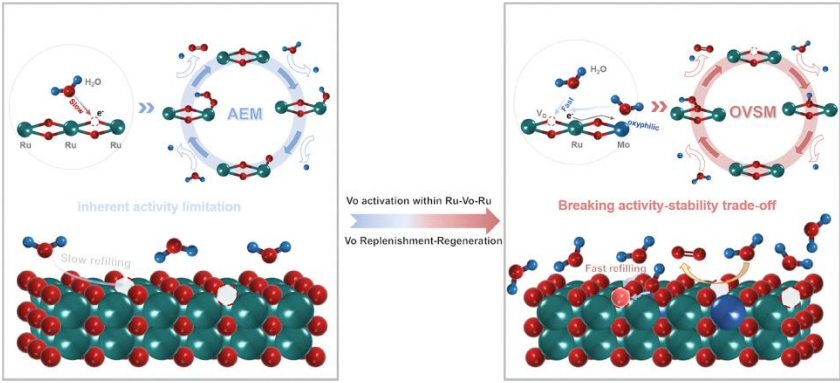
国家重点研发计划、中国科学院 B 类先导专项“单原子催化甲醇多相羰基化”等项目资助。（文/图 谈源龙、刘晓艳）

文章链接：<https://www.nature.com/articles/s41929-026-01580-1>

我室提出动态氧空位工程策略实现高效稳定酸性水氧化反应

近日，我室计算和数据驱动催化研究组（511 组）肖建平研究员团队和中国科学院长春应用化学研究所（以下简称“长春应化所”）邢巍研究员、肖梅玲研究员团队合作，在电化学水氧化催化剂设计和反应过程机制解析方面取得新进展。合作团队发展了钼掺杂诱导的动态氧空位工程策略，构建了钼掺杂二氧化钌（Mo-RuO₂）催化剂，实现了氧空位的“活化—补充—再生”可逆循环，有效提升了酸性水氧化过程的催化活性和稳定性。

钌基氧化物因其在酸性析氧反应（OER）中的本征活性而被视为质子交换膜电解水（PEMWE）阳极催化剂的关键候选材料之一。然而，其实际应用受限于晶格氧流失和不可逆结构降解所导致的稳定性不足。氧空位工程被认为是调控 RuO₂ 催化性能的有效手段，但传统静态调控策略难以捕捉 OER 过程中氧空位的动态演化，致使催化剂的活性与稳定性之间存在矛盾。



在本工作中，研究团队提出了动态氧空位工程策略，通过在 RuO₂ 中引入具有强电子捕获能力和高亲氧性的高价态钼，实现对 Ru-Vo-Ru 局域电子结构的调控。原位和准原位表征技术与理论计算表明，Mo 的引入降低了 Ru-Vo-Ru 单元的局域电子密度，将原本惰性的氧空位激活为反应活性位点，同时降低了氧空位补充与再生过程的能垒，促成了“活化—补充—再生”的可逆动态循环。该调控机制使催化剂转向有利且可持续的氧空位位点机制（OVSM）路径，同时提升了本征活性与长期稳定性。优化后的 Mo-RuO₂ 催化剂在 0.5 M 硫酸（H₂SO₄）中，于 10 mA cm⁻² 条件下过电位为 201 mV，并在该电流密度下稳定运行超过 2000 小

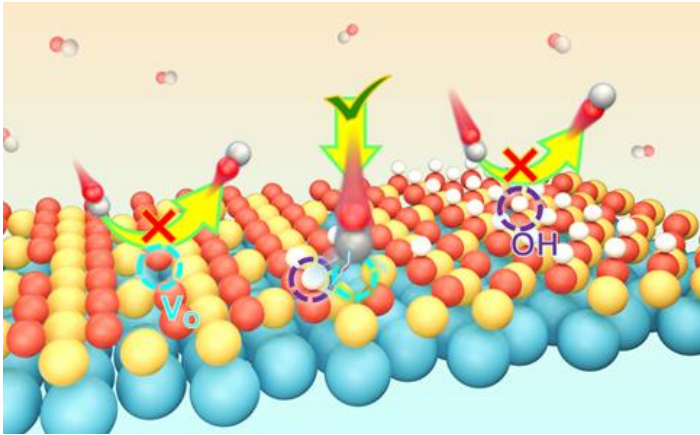
时。在与商业 Pt/C 析氢催化剂耦合构筑 PEMWE 系统中, 该催化剂在 80 °C 下达到 1.0 A cm⁻² 的电流密度所需电压为 1.547 V, 并在 500 mA cm⁻² 下稳定运行超过 300 小时。此外, 研究团队通过准原位 O K-edge 软 X 射线吸收光谱、原位差分电化学质谱、原位衰减全反射表面增强红外吸收光谱及原位表面增强拉曼光谱等表征技术, 结合电化学探针实验, 证实了 Mo-RuO₂ 遵循 OVSM 路径, 其中氧空位在反应过程中经历动态补充与再生, 而晶格氧不直接参与反应。理论计算表明, Mo 掺杂降低了 Ru-V_O-Ru 单元中氧空位反应位点的能垒, 使 OER 优势路径从传统吸附质演化机制 (AEM) 转向 OVSM 路径, 从根源上提升了催化活性。同时, Mo 掺杂增大了 O 2p 带中心与费米能级的间距, 并提高了 RuO₄ 溶解能垒, 从而增强了催化剂的结构稳定性。本工作为设计高性能、长寿命的 PEMWE 阳极催化剂提供了参考, 并加深了对动态氧空位演化与催化反应机制关联性的认识。

相关研究成果以“Engineering a dynamic oxygen vacancy activation-replenishment-regeneration cycle in Mo-doped RuO₂ for efficient and durable acidic water oxidation”为题, 于近日发表在《能源与环境科学》(*Energy & Environmental Science*) 上。该工作的共同第一作者是长春应化所博士研究生杨明和我室 511 组郭璞助理研究员。以上工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金等项目的资助。(文/图 郭璞、杨明)

文章链接: <https://doi.org/10.1039/d6ee02586b>

我室揭示氧化锰表面羟基和氧空位增强一氧化碳吸附的协同机制

近日, 我室纳米与界面催化研究中心表面科学与界面催化研究组 (521 组) 傅强研究员和慕仁涛研究员团队, 联合武汉大学顾向奎教授, 在氧化物表面分子吸附研究中取得新进展, 揭示了氧化锰 (MnO_x) 表面羟基与氧空位对一氧化碳 (CO) 吸附的协同增强机制。



金属氧化物表面羟基和氧空位是影响其催化性能的重要因素。该团队在前期研究中探讨了金属氧化物在多相催化反应中的界面作用机制 (*J. Am. Chem. Soc.*, 2024; *J. Am. Chem. Soc.*, 2025; *Nat. Commun.*, 2025), 通过构筑氧化物表界面羟基和氧空位活性位点提升了催化反应性能 (*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2025; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2025), 并借助高压扫描隧道显微镜原位表征了反应气氛下催化剂表面结构的动态演变 (*Nat. Commun.*, 2023; *J. Am. Chem. Soc.*, 2026)。

在本工作中, 研究人员通过在铂 (Pt(111)) 衬底表面构建单层 MnO_x , 并借助高分辨电子能量损失谱、高压扫描隧道显微镜和理论计算, 定量研究了 MnO_x 表面羟基和氧空位对 CO 分子吸附的调控作用。结果表明, 单层 MnO_x 表面上同时存在羟基与氧空位能够增强 CO 吸附, 而 CO 在相同条件下无法吸附于仅含羟基或氧空位的 MnO_x 表面; 进一步通过调控羟基与氧空位的含量, 可对 MnO_x 表面的 CO 吸附量进行有效调控。理论计算表明, 邻近羟基可增强氧空位处的电子密度, 为 CO 与表面成键提供更多电子, 进而增强 CO 吸附。该工作揭示了表面羟基与氧空位在增强 CO 吸附中的协同作用, 有助于理解金属氧化物表面 CO 吸附与活化机制。

相关研究成果以“Synergy Between Hydroxyl and Oxygen Vacancy Enhances CO Adsorption on Oxide Surface”为题, 发表在《德国应用化学》(*Angewandte Chemie International Edition*) 上。该成果的第一作者为我室 521 组已毕业博士张燃焜。该研究得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、能源催化转化全国重点实验室等项目的资助。(文/图 张燃焜)

文章链接: <https://doi.org/10.1002/anie.7285374>

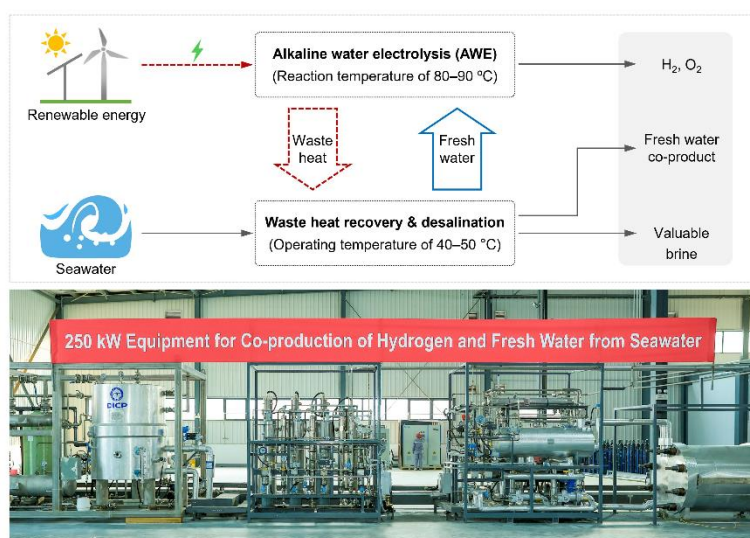
我室 250 千瓦级海水制氢联产淡水系统实现高效稳定运行



近日，我室能源与环境小分子催化研究中心（509 组群）邓德会研究员、刘艳廷副研究员团队在海水制氢领域取得新进展。团队提出并验证了“能量与物质互补利用”的海水制氢联产淡水（STHW）技术路线，建成的 250 千瓦级系统实现高效稳定运行，为海洋绿电规模化绿氢制备与海水资源化综合利用提供了技术支撑。

依托可再生能源开展电解水制氢，是发展绿色氢能经济的重要技术路径之一。海水储量丰富，以海水作为制氢原料，有望破解传统电解水高度依赖淡水资源的行业瓶颈。然而，海水直接电解仍面临副反应干扰、电极腐蚀、膜组件堵塞等技术难题；而“先淡化、后电解”的工艺路线，又存在海水淡化装备投资高、整体能耗大的短板。与此同时，现有商业化碱性电解水装置工作过程中约 30% 电能转化为 80 至 90℃ 低品位废热，工业场景中这部分热量难以回收利用，往往需要配套冷却水系统予以移除，进一步增加了系统能耗与淡水消耗。因此，开发低能耗、高稳定性的海水规模化制氢新路径，成为行业亟待攻克的关键科学和技术难题。

邓德会团队长期从事能源与环境小分子的催化转化研究，前期在电解水制氢方面取得系列进展（*J. Am. Chem. Soc.*, 2026; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2026; *Joule*, 2025; *Adv. Funct. Mater.*, 2025; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024; *Matter*, 2023; *ACS Catal.*, 2022; *Sci. Bull.*, 2021; *Adv. Mater.*, 2020; *Nano Energy*, 2018; *Nat. Commun.*, 2017; *Energy Environ. Sci.*, 2016; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2015; *Energy Environ. Sci.*, 2015; *RSC Adv.*, 2014; *Energy Environ. Sci.*, 2014）。针对上述挑战，团队提出并系统验证了“能量与物质互补利用”的海水制氢联产淡水技术路线，将电解水制氢与海水低温淡化进行深度耦合集成，充分回收利用电解产生的低品位废热驱动海水负压低温蒸馏淡化。系统产出的淡水，既可满足电解装置自身用水需求，还能够实现淡水额外供给；系统产生的浓海水，还可作为原料进一步开展盐、铀、溴等海洋资源提取回收，实现物质多级利用。



基于该技术思路，团队完成系统集成与逐级放大：20 千瓦中试系统可产出 3.8Nm³/h 氢气、联产 1.2kg/h 淡水，稳定运行超过 100 天；进一步放大至 250 千瓦级系统，可实现每小时产出 48Nm³ 高纯度氢气（纯度达 99.9999%），同步联产 32kg/h 淡水，相比传统碱性电解水制氢，系统电能利用率提升 14.4%，稳定运行超过 40 天。

该技术此前建成的中试系统已于 2023 年通过中国石油和化学工业联合会组织的科技成果评价，被认定为国际领先水平；250 千瓦级海水制氢联产淡水装置于 2024 年 8 月完成建设并顺利开车。本工作从科学原理创新、工艺耦合优化到工程系统放大开展全链条验证，为海上风电、波浪能等绿电耦合制氢、海水资源综合利用奠定科学基础与工程技术支撑。

相关研究成果以“A 250-kilowatt system for co-production of hydrogen and fresh water from seawater”为题，发表在《自然—能源》（*Nature Energy*）上。期刊同期发表了题为“一体化的蒸馏与电解系统（[A unified distillation and electrolysis system](#)）”的专家评述文章，对该成果进行了介绍。我室 509 组群博士研究生蒋赏、朱培鑫高级工程师为论文共同第一作者。该研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、中国科学院 B 类先导专项“能源电催化的动态解析与智能设计”、辽宁滨海实验室、辽宁省科技重大专项、我所创新基金等项目资助。（文/图 蒋赏）

文章链接：<https://doi.org/10.1038/s41560-026-02130-6>

新闻动态

道达尔能源中国区副总裁兼科技代表王鹏一行来组交流访问

9月15日，法国道达尔能源（TotalEnergies，以下简称“道达尔”）对外关系与市场研究副总裁兼中国科技代表王鹏一行到我室交流访问。李灿院士带领研究团队部分成员参加交流。

在座谈会上，李灿院士表示中国科学院大连化学物理研究所（以下简称“大连化物所”）与里昂催化研究所的中法国际合作历史悠久，双方围绕石油化工、环境能源等领域开展了长期催化研究合作。他提到，过去的合作得到了法国政府、道达尔和中国政府的共同支持。王鹏副总裁表示，道达尔与大连化物所拥有长期合作基础，此次来访旨在重启合作、搭建沟通桥梁，并积极探索在能源转型与新能源等方向的合作机遇。随后，道达尔技术分析经理何新介绍了道达尔总体情况及中国区最新的业务布局（OneChina Organization）。研究团队王庆楠、王欢、郑墨雯分别介绍了团队在生物质和 CO₂ 制备可持续航空燃料、CO₂ 加氢制液态阳光技术、离场电催化全分解硫化氢制氢和硫磺等应用研究方面的最新进展。双方人员围绕共同感兴趣的研究方向展开讨论，并初步探讨了未来合作模式，如建立联合实验室等。会后，来访团实地参观实验室沙盘，进一步了解团队在太阳能科学利用与工程化方面的布局和研究进展。双方此次交流为后续合作建立了良好开端，也为未来在能源转型领域的合作奠定了基础。

法国道达尔能源是一家全球性一体化能源公司，致力于生产和销售石油和生物燃料、天然气和低碳氢能以及可再生能源和电力，业务遍及全球 120 多个国家和地区，以可持续发展为核心开展项目运营。（文/图 503 组）



“第二届工业电化学技术交流会暨第十九届有机电化学与工业学术会议”在我所顺利举办

9月20日至22日，“第二届工业电化学技术交流会暨第十九届有机电化学与工业学术会议”在我所星海园区举行。本次会议由中国石油和化学工业联合会（以下简称“石化联合会”）指导，中国石油和化学工业联合会高端专用化学品专委会主办，我所、大连理工大学、辽宁师范大学共同承办，大会以“绿电·绿氢·低碳——可再生能源驱动的工业电化学”为主题。厦门大学孙世刚院士、吉林大学林海波教授担任大会主席，我室邓德会研究员担任执行主席，来自国内高校、科研院所，以及石化、氢能、氯碱等相关行业的专家学者、工程技术人员与企业界代表300余人参会。



9月21日上午，大会正式开幕。开幕式由邓德会主持，孙世刚、石化联合会副会长傅向升、我所副所长李先锋分别致辞。会议围绕可再生能源驱动下的工业电化学前沿方向，聚焦电化学反应工程、电解与电合成、电化学储能、电化学工业装置与应用等关键议题，邀请众多专家作了100余场学术报告。杨裕生院士、孙世刚、西湖大学孙立成院士、北京大学郭少军教授、林海波、武汉大学雷爱文教授、李先锋、我室主任陈忠伟院士分别作了大会报告，此外还有26个主旨报告和69个邀请报告等。本次大会展示了我国在工业电化学、有机电化学、电解装备开发等方向的最新研究成果与工程实践进展。同时，为激发青年科研人员创新活力，会议同步设置墙报展示环节，为青年学者提供展示成果、思想碰撞的交流机会。会议期间，与会人员围绕工业电化学发展面临的机遇、关键科学问题与产业化瓶颈展开了研讨。9月22日上午，大会举行闭幕式，闭幕式由石化联合会主任李文军主持，本次会议设置了“JEC 优秀墙报奖”，有10位青年学者获奖，孙世刚为各位获奖者颁发了证书。



本次会议为工业电化学领域的学术界与产业界搭建了交流平台，促进了科研工作者、工程技术人员和企业界代表之间的沟通协作，为推动相关交流合作提供有益载体。（文/高鹤华 图/刘雪昌）



队伍建设

我室张国辉、胡景庭被聘为“特聘研究员”

根据我所有关规定，国家自然科学基金青年科学基金项目（B 类）获得者张国辉（502 组群）、胡景庭（509 组群）被聘为“特聘研究员”（化物所发〔2026〕111 号）。