能源催化转化全国重点实验室工作简报

< 2026 年 10 月 >

能源催化转化全国重点实验室编　　2026 年 10 月 31 日

研究进展

我室开发快速原位二维固体核磁共振技术揭示质子调控分子筛晶化机制.....01

我室提出原子尺度界面焊接策略解决质子陶瓷电池界面活性受限问题.....02

我室揭示析氢界面双电层空间组织影响质子传输的微观机制.....03

我室实现空气主份直接合成高值碳—氮—氧化学品.....04

新闻动态

“第二届空气主份转化化学国际与国内研讨会”在我所顺利举行.....07

北京大学马丁院士来所作第 56 期张大煜讲座.....09

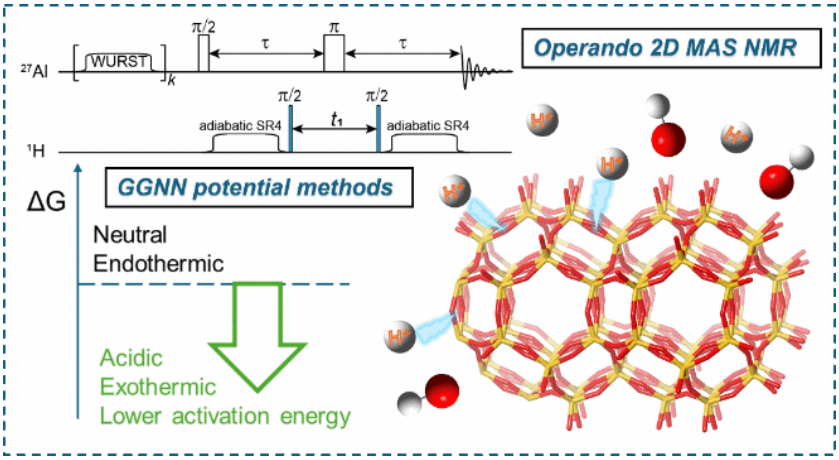
所党委举办第二十九期科学家精神报告会.....10

我室一项科研成果荣获 2025 年度大连市科学技术奖励.....11

研究进展

我室开发快速原位二维固体核磁共振技术
揭示质子调控分子筛晶化机制

近日，我室纳米与界面催化研究中心固体核磁共振及前沿应用研究组（524组）梁力鑫副研究员、侯广进研究员团队，与南开大学戴卫理教授团队合作，在固体核磁共振技术与分子筛晶化机制研究方面取得新进展。团队发展了超快原位二维固体核磁共振技术，在原子尺度揭示了酸性条件下质子介导的主客体相互作用，以及其对磷铝酸盐分子筛（$AlPO_4$-n）和硅磷铝酸盐分子筛（SAPO-n）成核及形貌演化的调控机制。



分子筛的成核和晶体生长过程直接影响其骨架拓扑结构及催化性能。已有分子筛晶化机制研究主要集中于碱性条件下的硅铝分子筛体系，而 $AlPO_4$-n 和 SAPO-n 分子筛通常在中性或酸性条件下晶化。尽管酸度是此类分子筛合成中的重要调控参数，但其对前驱体水解缩合、成核动力学及主客体相互作用的影响机制仍缺乏深入认识。

在本工作中，团队发展了基于绝热 SR4 偶极重耦序列的超快速二维 ^{1}H-^{27}Al HMQC 固体核磁共振技术。该方法通过引入 tanh/tan 绝热反转脉冲，提高了四极核体系中的偶极重耦效率，可在 30 秒内获得高质量二维 ^{1}H-^{27}Al 相关谱。结合团队前期开发的高温高压原位固体核磁共振动态表征技术，该技术可在高温高压原位条件下实时追踪分子筛晶化过程，并获取 Al 物种、羟基及有机结构导向剂之间的空间相互作用信息，为揭示成核与形貌演化机制提供了新的技术手段。上述超快二维相关谱与高温高压原位动态表征技术的结合，为深入开展分子筛晶化机制研究提供了关键手段。

进一步，研究团队借助上述技术，通过调控前驱体酸度发现，质子化促进了 $AlPO_4$-n 和 SAPO-n 分子筛成核，并诱导晶体由传统块状或立方形貌向纳米片、

纳米棒等各向异性形貌转变。理论计算进一步揭示，质子在分子筛成核过程中同时发挥动力学和热力学调控作用，可降低 P-O-Al 缩合反应的活化能，并增强骨架组装的热力学驱动力。

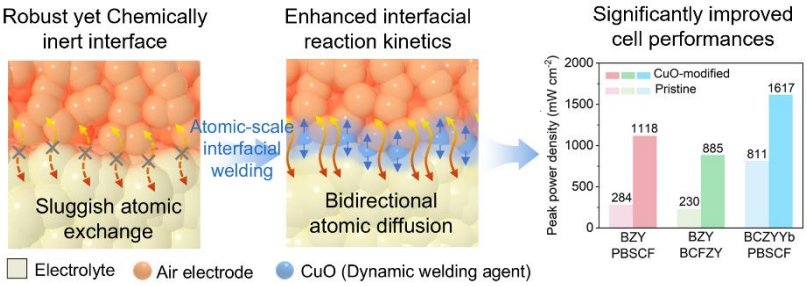
相关研究成果以“Proton-Mediated Host–Guest Interactions Direct Nucleation and Morphology Evolution in Molecular Sieve Crystallization”为题，发表在《美国化学会志》（*Journal of the American Chemical Society*）上。该文章的第一作者为我室博士后吴道宁。该工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、大连市科技人才创新支持政策实施计划、我所创新基金等项目的资助。（文/图 吴道宁）

文章链接：https://doi.org/10.1021/jacs.6c12306

****

我室提出原子尺度界面焊接策略解决质子陶瓷电池界面活性受限问题

近日，我室无机膜与催化新材料研究组（504 组）杨维慎研究员、朱雪峰研究员团队提出纳米颗粒介导的原子尺度界面焊接策略，通过促进电极与电解质之间的元素迁移和化学融合，解决了高稳定性陶瓷电解质界面反应活性不足的问题，提升了质子导体陶瓷电池的电化学性能。



质子导体陶瓷电池是一类高效能源转换装置，其性能与电解质的本征离子传导能力及电极—电解质界面反应密切相关。以钇掺杂锆酸钡（BZY）为代表的质子导体电解质具有较好的化学稳定性，但其表面化学惰性较强，难以与电极形成牢固的界面结合，导致电极脱落、反应动力学迟缓等问题，限制了电解质本征性能的发挥。

针对上述问题，研究团队引入氧化铜（CuO）纳米颗粒作为电极—电解界面焊接介质，通过驱动电极（PBSCF）与电解质（BZY）之间的元素双向扩散，实现了原子尺度的界面结合。研究发现，CuO 介导的界面焊接作用能够将原本存在纳米孔隙、不连续接触的界面转变为紧密结合的化学键合界面。该策略不仅能在

CuO 纳米颗粒处高效构筑界面连接，还能诱导铜物种向邻近区域迁移来强化界面结合。电极与电解质的结合强度提高至原来的 2.85 倍，电池峰值功率密度提高至原来的 3.94 倍。此外，该策略在不同电极和电解质体系中均表现出良好的适用性，为缓解陶瓷材料化学稳定性与界面反应活性之间的矛盾提供了新思路。

相关研究成果以“Atomic-Scale Interfacial Welding Unlocks the Electrochemical Potential of Chemically Robust Proton-Conducting Electrolytes”为题，于近日发表在《应用催化 B-环境与能源》（*Applied Catalysis B-Environment and Energy*）上。该工作的第一作者为我室 504 组博士毕业生冯秋霞。上述研究工作得到了国家自然科学基金、我所创新基金等项目的资助。（文/图 冯秋霞）

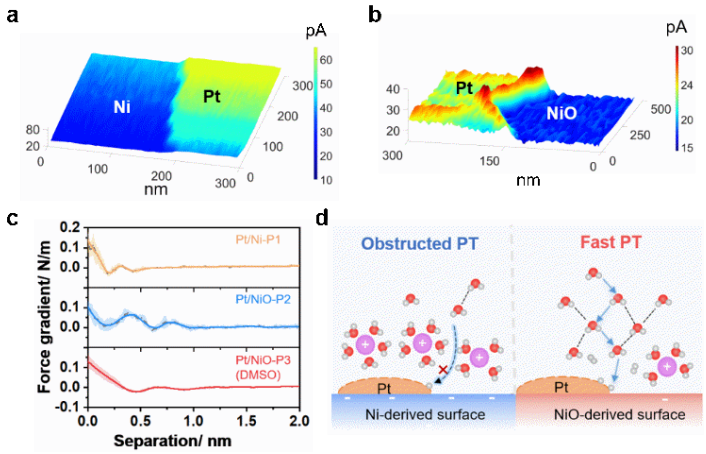
文章链接：https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2026.127609

****

我室揭示析氢界面双电层空间组织影响质子传输的微观机制

近日，我室太阳能研究部（DNL16）范峰滔研究员团队联合武汉大学陈胜利教授、北京科技大学孙童教授，在电解水析氢催化研究领域取得新进展。团队以铂—镍（Pt-Ni）模型体系为对象，结合扫描电化学显微镜（SECM）、频率调制原子力显微镜（FM-AFM）及分子动力学模拟等手段，建立了局域催化活性、表面电荷分布与界面水合结构之间的关联，揭示了界面微环境调控碱性析氢反应（HER）动力学的微观机制。

在碱性 HER 中，电极和电解液界面微环境对反应动力学具有重要影响。界面电场、氢键网络及水合结构等因素可影响界面质子传输过程，进而调控析氢反应速率。然而，实际催化剂表面结构复杂，活性位点难以准确识别，加之传统表征技术空间分辨能力有限，在微纳尺度上建立局域催化活性、双电层结构与质子传输过程之间的直接关联仍面临挑战。



针对这一问题，研究团队利用 SECM、FM-AFM 等空间分辨表征技术，在微纳尺度上建立了催化活性与双电层结构之间的关联。研究发现，相较于 Pt/Ni 衍生界面，铂/氧化镍（Pt/NiO）衍生界面具有更低的零电荷电位（PZC）和更连续的界面氢键网络，并表现出更高的局域 HER 活性。研究进一步表明，双电层并非均匀、静态地覆盖在催化剂表面的被动环境，而是具有空间异质性的反应介质。不同活性位点周围的双电层具有不同的局域电荷状态和水合结构，该空间异质性可进一步影响氢键网络组织，以及反应物种由体相向活性位点的传输过程。该研究将传统基于活性位点与吸附能的催化反应认识，拓展至活性位点—双电层结构—质子传输过程协同作用的研究框架，为理解和调控碱性析氢反应动力学提供了新的视角。

近年来，研究团队围绕光/电催化界面关键物理化学过程的原位表征持续开展研究，发展了 AFM-SECM 双通道纳米成像方法，实现了反应条件下催化活性位点与界面电荷传输行为的同步可视化表征（*Angew. Chem. Int. Ed.*，2026；*J. Am. Chem. Soc.*，2026；*Nat. Nanotechnol.*，2026）；建立了固液界面固相电荷传输原位成像方法，实现了催化剂内部电子输运过程的空间分辨测量（*Nature*，2022；*Nat. Protoc.*，2024）；发展了液相局域电势原位检测技术，实现了界面电势分布的纳米尺度解析（*J. Am. Chem. Soc.*，2025）。本工作在前期对电荷传输和界面电势空间分布研究的基础上，进一步将空间分辨表征拓展至界面水合结构与质子传输环境，为认识局域双电层的空间组织及其对电催化反应动力学的影响提供了新的研究思路。

相关研究成果以“Electric Double Layer Organization of Proton-Transfer Pathways Regulates Alkaline Hydrogen Evolution”为题，于近日发表在《美国化学会志》（*Journal of the American Chemical Society*）上。该工作的第一作者是我室 DNL1600 组群博士研究生李玉燃。该工作得到国家自然科学基金、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”、新基石科学基金会科学探索奖等项目的资助。（文/图 李玉燃）

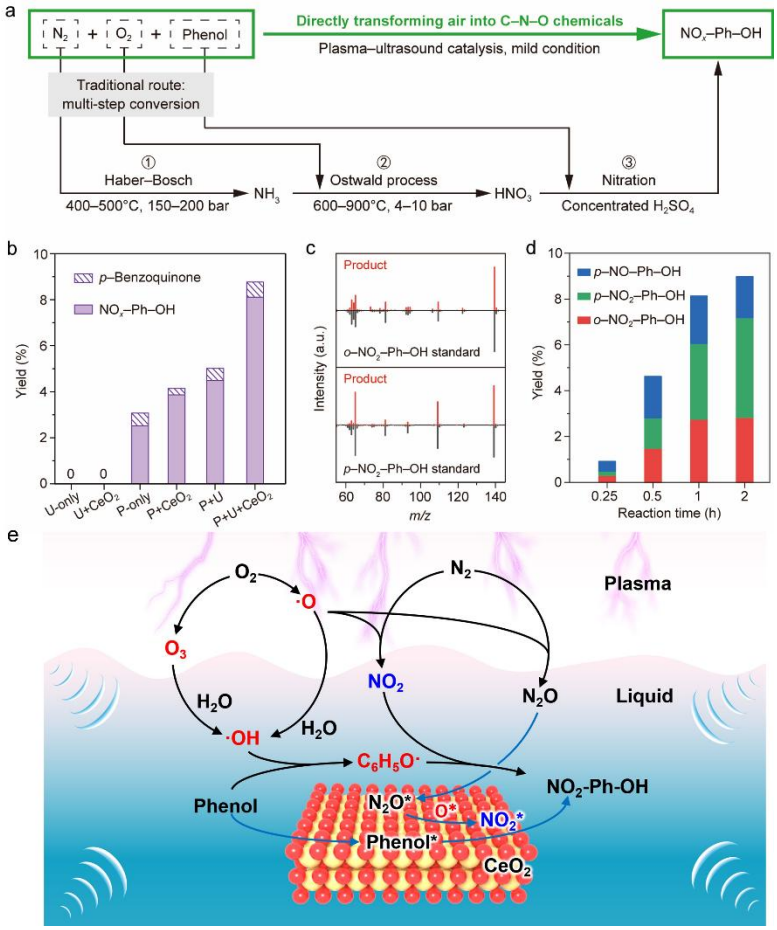
文章链接：https://doi.org/10.1021/jacs.6c12095

****

我室实现空气主份直接合成高值碳—氮—氧化学品

近日，我室能源与环境小分子催化研究中心（509 组群）邓德会研究员和于良研究员团队在直接用空气主份作为氮源和氧源合成高值碳—氮—氧（C–N–O）化学品领域取得新进展。团队提出了非热等离子体—超声—催化（PUC）耦合新

途径，在温和条件（5 至 25 °C、常压）下实现了空气主份与苯酚直接共转化制高附加值硝基芳烃化合物。该过程避免了传统路线中的多步骤、苛刻反应条件、高污染排放等问题，为温和条件下由空气出发直接合成高值 C–N–O 化合物提供了新思路。



硝基芳香化合物是合成药物、染料、炸药等材料的重要原料。其传统合成路线通常采用多步过程：先经哈伯—博施（Haber-Bosch）工艺（400 至 500 °C，15 至 20 MPa）将氮气（N_2）转化合成氨，再经奥斯特瓦尔德（Ostwald）过程（600 至 900 °C）将氨气（NH_3）和氧气（O_2）转化制硝酸，进一步在浓硝酸和浓硫酸中进行硝化反应，整个过程流程长、能耗高、污染大。相比之下，在温和条件下直接利用空气的主要成分 N_2 和 O_2 作为氮源和氧源进行硝化反应，是合成硝基芳香化学品的理想反应路线。然而，由于 N_2 极为惰性，其活化往往需要苛刻条件，这容易导致 O_2 和芳香族底物被过度活化并氧化生成大量副产物。如何在温和条件下实现反应物的可控活化，以及 C–N 和 N–O 键的选择性构筑，是该领域面临的关键挑战。

邓德会团队长期致力于能源与环境小分子的催化转化研究，前期在 N_2 等惰性小分子催化转化方面取得系列进展（*Nat. Synth.*，2026；*Nat. Synth.*，2024；*Nat.*

Catal.，2023；*Natl. Sci. Rev.*，2022；*Chem*，2026；*J. Am. Chem. Soc.*，2026；*J. Am. Chem. Soc.*，2025；*J. Am. Chem. Soc.*，2025；*J. Am. Chem. Soc.*，2024；*Nat. Commun.*，2025）。针对上述问题，团队开发了非热 PUC 耦合反应新方法，并设计了等离子体气相—超声液相级联反应器，在温和条件下实现了空气主份与苯酚直接共转化制硝基芳烃化合物（硝基苯酚与亚硝基苯酚）。在常温（5 至 25 ℃）、常压条件下，以二氧化铈（CeO_2）为液相催化剂，硝基芳烃的总产率达 8.1%，总选择性达 92.5%。机理研究表明，空气等离子体产生的活性氧物种（氧自由基、臭氧等）和氮氧化物（NO、NO_2、N_2O 等）进入液相后，结合超声空化效应对气液传质和反应动力学的增强，开启了两条后续反应路径：一是均相溶液反应路径，苯酚被活性氧物种氧化为苯氧自由基（$C_6H_5O\cdot$），进而被二氧化氮（NO_2）或一氧化氮（NO）硝化生成产物；二是多相催化路径，CeO_2 表面可催化一氧化二氮（N_2O）向 NO 和 NO_2 转化，并进一步与表面吸附态苯酚发生硝化反应，从而提高了反应效率。该过程通过对空气主份活化与苯酚活化步骤的空间分离，避免了苯酚过度活化与氧化，从而提高了产物选择性，为温和条件下直接利用空气主份和有机底物合成高值 C–N–O 化学品开辟了新途径。

相关研究成果以“Upgrading N_2 and O_2 into valuable C–N–O chemicals”为题，发表在《国家科学评论》（*National Science Review*）上。上述工作得到国家自然科学基金委“空气主份转化化学”卓越研究群体项目、国家重点研发计划、能源催化转化全国重点实验室开放合作基金等项目的资助。（文/图 李缔）

文章链接：https://doi.org/10.1093/nsr/nwag556

****

新闻动态

“第二届空气主份转化化学国际与国内研讨会”在我所顺利举行

10 月 8 日至 11 日，由国家自然科学基金委员会“空气主份转化化学”卓越研究群体、北京大学、复旦大学和我所联合发起的“第二届空气主份转化化学国际与国内研讨会”（以下简称“研讨会”）在我所星海园区举行。北京大学席振峰院士担任大会主席，我室邓德会研究员担任执行主席，共有 300 余名国内外专家和学者参会。





研讨会开幕式由邓德会主持，席振峰和我所党委书记王峰分别致辞。本次研讨会聚焦空气主要成分氮气和氧气的直接、高效、温和转化，围绕氮气活化与转化、氧气氧化与氧合、氮气氧气耦合转化等主题，邀请了国内外学者进行了近 60 场学术报告。东京工业大学 Hideo Hosono 教授、英国曼彻斯特大学 Stephen Liddle 教授、瑞士联邦理工学院 Marinella Mazzanti 教授、新加坡国立大学 Ning Yan 教授、清华大学唐军旺教授、席振峰、复旦大学麻生明院士和施章杰教授、我所陈萍研究员和邓德会分别作了国际会议大会报告，席振峰、清华大学李隽院士、浙江大学李浩然教授、福州大学江莉龙教授、上海科技大学胡培君教授、中国科学院理化技术研究所张铁锐研究员分别作了国内会议的大会报告。会议还设置了 36 个邀请报告和近 30 个墙报，与会者围绕空气主份转化化学的挑战、机遇及最新进展等进行了深入交流。10 月 11 日上午，研讨会举行闭幕式，闭幕式由陈萍主持。本次会议设置了“JEC 优秀墙报奖”，共 10 位青年学者获奖，席振峰和麻生明为获奖者颁发了证书。

此外，为了进一步加强交叉融合研究，10 月 11 日下午，“空气主份转化化学”卓越研究群体项目成员举行了内部研讨会，对项目的前期成果进展和未来计划进行了深入探讨，围绕氮气分子断键机制、直接以氮气为氮源的合成化学、绿色氧合与氧化，以及氮气、氧气、碳源耦合转化等方面开展了交流。


Electronic Materials as Catalysts
for Activation of N_2,CO_2 and H_2
The Second International Symposium on Air Key Component Transformation @ Dalian, Oct.9, 2026
Institute of
SCIENCE TOKYO
Hideo HOSONO
Institute of Science Tokyo (former Tokyo Institute of Technology)
& National Institute for Materials Science(NIMS),Japan


From Photons to Photons-Phonons Co-driven Catalysis
(PPCC) for Small Molecules' Activation
Prof. Junwang (John) Tang (唐军旺)
Industrial Catalysis Center (工业催化中心)
Department of Chemical Engineering (化工系)
Tsinghua University (清华大学)

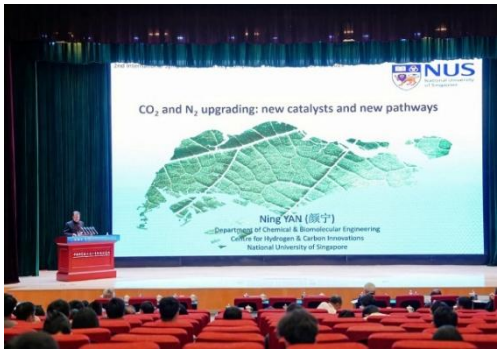

Aerobic Oxidations
Shengming Ma


Small Molecule Activation and Catalytic Fixation at Uranium and
Titanium Triamidoamine Complexes
铀和钛三酰胺基胺配合物上的小分子活化与催化固定
Prof. Steve Liddle
Department of Chemistry and Centre for Radiochemistry Research, The University of Manchester, UK
The Second International Symposium on Air Key Component Transformation, Dalian, 2026


Dinitrogen Activation at the Bottom of the Periodic Table
EPFL
Marinella Mazzanti
EPFL, Switzerland
The Second International Symposium on
Air Key Component Transformation
Dalian 9 October 2026


The 2nd International Symposium on
Air Key Component Transformation
Activation and Transformation of N_2
by N_2N-Ligated Ti-Complexes
Zhang-Jie Shi
Fudan University
Oct. 8-9, 2026
Dalian, China


Alkali Hydrides for Ammonia Synthesis


NUS
CO_2 and N_2 upgrading: new catalysts and new pathways
Ning YAN (颜宁)
Department of Chemical & Biomolecular Engineering
Centre for Hydrogen & Carbon Innovations
National University of Singapore


Quantum-Chemical Studies of Activation and Conversion of
$^1N_2$ and $^3O_2$: The OOH and NNH Pathway
Jun Li (李 隽)
Theoretical Chemistry Center, Department of Chemistry, Tsinghua University, Beijing, China
清华大学化学系理论化学中心
第二届空气主份转化化学研讨会
Dalian, Oct 9-11, 2026


第二届空气主份转化化学研讨会
空气氧化反应的工业实践
与机理研究
李浩然
浙江大学化学系
2026年10月 大连









本次研讨会为空气主份转化化学领域的研究人员提供了交流平台，促进了均相化学与多相化学的交叉融合，有助于推动氮气活化与氧气氧化相关研究的深入开展。（文/高鹤华 图/刘雪昌）

****

北京大学马丁院士来所作第 56 期张大煜讲座

10 月 26 日，北京大学马丁院士应邀在我所星海园区能源基础楼作了题为“电子结构决定金属—载体强相互作用”的第 56 期张大煜讲座。我所党委书记王峰、副所长黄延强，以及科研、职能部门相关人员等 300 余人通过线下和线上方式参加了报告会。报告会由邓德会研究员主持，王峰为马丁颁发了张大煜讲座证书。





报告中，马丁围绕负载型金属催化剂的催化性能调控，系统阐述了金属—载体强相互作用（SMSI）中的动态金属—载体电子耦合效应，以及其在调控催化选择性与活性中的关键作用。他重点介绍了在 Ru/TiO_2 催化 CO_2 加氢模型体系中，反应气氛诱导的 TiO_x 薄层氧化还原演变与其对 Ru 价态的调控机制，以及在 TiO_x 覆盖度和 Ru 位点密度无明显变化情况下的产物选择性翻转，阐述了 Ru 纳米粒子与 TiO_x 薄层之间的动态电子耦合在调控催化选择性与活性中的决定性作用。报告结束后，马丁与现场科研人员及研究生围绕负载型金属催化剂中的电子传递机制、电子结构原位表征、催化活性位设计等科学问题，以及研究生培养等方面进行了深入讨论和交流。

访问期间，马丁与能源与环境小分子催化研究中心、纳米与界面催化研究中心、太阳能科学利用研究中心、低碳催化与工程研究中心、催化与新材料研究中心等团队的科研人员及研究生代表进行了交流。（文/高鹤华 图/夏一丁）

****

所党委举办第二十九期科学家精神报告会

10 月 28 日上午，所党委举办第二十九期科学家精神报告会，此次报告会由我室党总支书记范峰滔、副书记邓德会共同策划，特邀复旦大学李伟教授作题为《于介观天地拓荒，以科学家精神铸魂》专题报告，讲述我所 1987 级优秀校友、我室毕业的赵东元矢志报国、勇攀高峰的科学家精神。所党委委员、党委办公室主任王书诏主持报告会。本次报告会在星海园区设主会场，在能源学院设视频分会场，300 余人在现场或线上参会。





李伟讲述了赵东元科研报国的先进事迹，诠释了他所亲历并凝练的求真务实、理性批判、包容开放、恪守伦理、向善向美的新时代科学家精神。赵东元开创了介孔材料新体系，采用酸—碱配对自组装方法合成无机介孔金属氧化材料，合成了一系列非硅基功能介孔材料，获 2004 年国家自然科学奖二等奖；在国际上率

先提出有机—有机自组装策略，创制有序介孔高分子和碳材料，获 2020 年国家自然科学奖一等奖；为保障中国能源安全，聚力介孔材料在重油催化裂化中的应用，创制了多级孔核壳结构微—介孔催化剂，将基础研究推向工业化应用，获 2021 年中国石化前瞻性基础性研究科学奖一等奖。赵东元既以持续创新勇闯科研“无人区”，又坚守三尺讲台，践行立德树人使命，先后获评全国劳动模范、全国教书育人楷模称号。





会上，范峰滔、邓德会代表全所师生，分别为李伟颁发大连化物所科学家精神宣讲团讲师聘书与纪念牌。（文/曹舒畅 图/高杨）

****

我室一项科研成果荣获 2025 年度大连市科学技术奖励

近日，大连市人民政府发布了《关于 2025 年度大连市科学技术奖励的决定》，我室吴忠帅研究员主持完成的“高比能高功率超级电容器的理性构筑与机理研究”项目荣获大连市自然科学奖一等奖。（文/孙洪春）

****