

2025 年度安徽省科学技术奖推荐项目公示内容

一、自然科学奖

项目名称	面向二氧化碳加氢催化材料的设计与研究
提名者	安徽工业大学
提名意见	该项目面向绿氢消纳与碳资源化利用的重大需求，围绕如何通过催化材料活性中心的原子级精准设计，实现对CO₂分子活化及碳碳键偶联过程精确调控这一核心科学问题，在国家自然科学基金项目资助下，取得了多项原创性科学发现。（1）提出了多原子团簇“氢池”催化材料体系，发现N、S等非金属原子与Co、Pt配位后，H₂可发生异裂形成N-H、S-H等“氢池”物种，直接参与CO₂活化并生成HCOO*或COOH*中间体，规避传统中性H*原子加氢路径，从而显著促进CO₂活化转化。（2）发展了“高对称性模板原位共形生长低对称性规整晶面”的材料合成策略，首次实现特定碳化铁晶面的选择性暴露，并据此揭示晶面对碳碳键偶联的调控机制；在此基础上，构筑Fe₅C₂-Fe₃O₄-Cu三相复合界面催化材料，揭示CO插入与碳化物协同介导的碳链增长机制，实现了常压下CO₂加氢合成长链烯烃（C₄₊=）选择性的世界纪录。项目成果发表在《Nature Energy》（1篇）、《Nature Nanotechnology》（1篇）、《Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America》（1篇）、《Nature Communications》（2篇），其中三篇论文入选ESI高被引文章。
项目简介	利用可再生能源电解水制得的绿氢将二氧化碳（CO₂）加氢转化为高值化学品，既可实现碳的资源化利用、助力“双碳”目标，又可有效消纳绿氢、解决可再生能源大规模并网带来的存储难题。其核心科学问题在于如何通过对催化材料活性中心的原子级精准设计，实现对CO₂分子活化和碳碳键偶联过程的精确调控。该团队在国家自然科学基金项目资助下，从多原子团簇“氢池”催化材料体系促进CO₂活化和碳化铁晶面/界面调控碳碳键偶联入手，设计并制备了系列新型催化材料，形成了以下两方面核心发现。 （1）提出了多原子团簇“氢池”催化材料体系，揭示了近邻“氢池”的协同作用机制，实现了CO₂加氢制备甲醇、甲酸等C₁产物。该团队发现N、S、O等非金属原子与Co、Pt配位后，H₂会异裂形成N-H、S-H和O-H等“氢池”，直接参与CO₂活化生成HCOO*或COOH*中间体，绕开传统中性H*原子加氢路径，从而显著促进CO₂活化过程。该团队发现在传统的钴基催化剂引入氨基氢，形成“Co₄-NH”局域氢池促进了二氧化碳的活化和转化，其本征活性是传统钴基催化剂的64倍（代表性论文1）。该团队进一步在Mo基催化剂表面构筑Mo₆-(SH)₃-Pt₁局域氢池，并通过其近邻效应精准调控了CO₂加氢路径（代表性论文2）。在孤立的Mo₆-(SH)₃-Pt₁上，CO₂经历C(OH)₂*中间体转化为甲醇；而在近邻活性中心上，CO₂加氢形成HCOOH*，并脱附得到甲酸。在活性中心精准调控的基础上，进一步发展了催化材料的公斤级规模化制备方法（代表性论文3）。 （2）发展了碳化铁晶面与界面的可控构筑方法，揭示了其对碳碳键偶联的调控机制，实现了CO₂加氢制备长链烯烃。碳化铁（如χ-Fe₅C₂）是用于碳碳键偶联的经典催化材料，但其低对称性单斜晶体特定晶面的可控合成是长期未解的材料学难题。该团队发展了“高对称性模板原位共形生长低对称性规整晶面”的材料合成策略，首次实现了χ-Fe₅C₂{202}和{112}晶面的选择性暴露，并基于此揭示了晶面对

	碳碳键偶联的调控机制（代表性论文 4）。该团队在碳化铁碳碳偶联的基础上，耦合了 Fe_3O_4 的逆水气变换功能与 Cu 的 CO 插入功能，构筑出 $\text{Fe}_5\text{C}_2\text{-Fe}_3\text{O}_4\text{-Cu}$ 三相复合界面催化材料，从而实现了常压下 CO_2 加氢合成长链烯烃（C_{4+}）选择性的世界纪录（代表性论文 5）。 该项目围绕 CO_2 加氢催化材料展开研究，发展了多原子团簇“氢池”和可控碳化铁晶面/界面两类催化材料体系，揭示出反应过程中碳氧键活化和碳碳键偶联机制。项目成果发表在《Nature Energy》（1 篇）、《Nature Nanotechnology》（1 篇）、《Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America》（1 篇）、《Nature Communications》（2 篇），其中三篇论文入选 ESI 高被引文章。
代表性论文专著目录	1. Liangbing Wang, Wenbo Zhang, Xusheng Zheng, Yizhen Chen, Wenlong Wu, Jianxiang Qiu, Xiangchen Zhao, Xiao Zhao, Yizhou Dai, Jie Zeng, Incorporating nitrogen atoms into cobalt nanosheets as a strategy to boost catalytic activity toward CO_2 hydrogenation, Nature Energy, 2017, 2, 869-876. 2. Hongliang Li, Liangbing Wang, Yizhou Dai, Zhengtian Pu, Zhuohan Lao, Yawei Chen, Menglin Wang, Xusheng Zheng, Junfa Zhu, Wenhua Zhang, Rui Si, Chao Ma, Jie Zeng, Synergetic interaction between neighbouring platinum monomers in CO_2 hydrogenation, Nature Nanotechnology, 2018, 13, 411-417. 3. Fan Liu, Yi Hu, Zehua Qu, Xin Ma, Zaifeng Li, Rui Zhu, Yan Yan, Bihan Wen, Qianwen Ma, Minjie Liu, Shuang Zhao, Zhanxi Fan, Jie Zeng, Mingkai Liu, Zhong Jin, Zhiqun Lin, Rapid production of kilogram-scale graphene nanoribbons with tunable interlayer spacing for an array of renewable, energy. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2023, 110, e2303262120. 4. Wenlong Wu, Jiahua Luo, Jiankang Zhao, Menglin Wang, Lei Luo, Sunpei Hu, Bingxuan He, Chao Ma, Hongliang Li, Jie Zeng, Facet sensitivity of iron carbides in Fischer-Tropsch synthesis, Nature Communications, 2024, 15, 6108. 5. Zhongling Li, Wenlong Wu, Menglin Wang, Yanan Wang, Xinlong Ma, Lei Luo, Yue Chen, Kaiwen Fan, Yang Pan, Hongliang Li, Jie Zeng, Ambient-pressure hydrogenation of CO_2 into long-chain olefins, Nature Communications, 2022, 13, 2396.
主要完成人	曾杰、李洪良、吴文龙、王梁炳、闫岩
主要完成单位	中国科学技术大学、安徽工业大学