窗体顶端

|  |
| --- |
| [首页](http://www.nsfc.gov.cn/publish/portal0) IMG_256 [项目指南](http://www.nsfc.gov.cn/publish/portal0/tab568) IMG_257 [2018年项目指南](http://www.nsfc.gov.cn/publish/portal0/tab568) **“面向低碳能源转化关键反应的二维催化剂设计与应用”重大项目指南** |

窗体底端

高效催化剂是提高能源利用效率的关键因素。二维固体具有高的原子级表面利用率和限域电子调控特性，适于设计低碳能源高效化学转化的实用催化剂。本项目拟围绕二维固体催化的基本科学问题，重点面向低碳能源化学中的关键化学反应，系统开展二维催化材料制备和本征物性调控、表面配位化学和限域构效关系等研究，探索二维催化作用的新机制和反应新过程，建立高效的二维催化剂体系，为低碳能源高效转化提供科学和技术支撑。

　　**一、科学目标**

　　以调控二维固体的表面、电子、限域效应为手段，以优化催化性能为目标，聚焦低碳能源转化中二氧化碳还原、催化加氢和甲烷活化转化等关键反应。构建和完善二维固体制备方法学，从电子结构层面揭示二维空间受限催化过程中电子转移、化学键活化机制和产物选择性调控规律，揭示若干二维表面催化新反应机制与过程，丰富和发展表界面配位化学相关理论；创制高效二维固体催化新体系，力争实现若干二维催化剂的产业化应用；培育一支国际上有重要影响的研究队伍，提升我国在二维固体催化基础科学和应用基础科学研究的源头创新能力。

　　**二、研究内容**

　　（一）二维催化剂的设计与宏量可控制备。

　　围绕原子层厚二维纳米固体的可控制备和本征物性维度效应等科学问题，通过原位表征和多尺度模拟，解析二维材料的基本结构和生长机制；发展和完善若干厚度可控、尺寸均匀二维催化剂合成新策略，并实现宏量制备；深入研究二维材料构效关系，协同优化表面能、本征电导和催化活性位结构。

　　（二）二维半导体催化的二氧化碳还原。

　　针对二氧化碳催化还原过程中电子转移路径和关键决速步，设计并构筑若干二维催化材料体系，调控二维半导体的费米面态密度、带隙宽度、能级匹配度等，揭示催化剂的电子结构与二氧化碳还原活性、选择性和稳定性的内在联系；研制稳定高效的二氧化碳催化还原的原型器件。

　　（三）二维金属材料催化的选择性加氢。

　　针对金属纳米催化剂表面结构复杂多样导致其参与众多加氢催化选择性差的难题，重点以对催化选择性要求高的硝基、炔基加氢等反应为研究对象，构筑二维纳米金属模型催化剂，解析催化活性位点的表面配位结构，在分子水平上理解并揭示相关表面配位基元对催化活性和选择性的调控本质，以发展兼顾催化活性和选择性的金属纳米催化材料制备新策略，推进绿色催化加氢的工业应用。

　　（四）二维非贵金属催化的甲烷转化。

　　针对甲烷C-H键选择活化和定向转化的难题，利用二维固体表面对催化活性中心的限域调控作用，构筑多级有序二维非贵金属催化材料，探索和揭示二维限域催化的反应机制和转化新途径，提高甲烷等能源小分子转化的催化选择性和效率，发展具有工业应用前景的天然气低碳转化二维固体催化体系。

　　**三、申请注意事项**

　　（一）申请书的附注说明选择“面向低碳能源转化关键反应的二维催化剂设计与应用”。

　　（二）申请人申请的直接费用预算不得超过2000万元/项（含2000万元/项）。

　　（三）本项目由化学科学部负责受理。