

陕西省自然科学奖公示信息

(2025年度)

一、项目基本情况

项目名称	CO ₂ 与低碳烷烃高效转化催化基础与调控机制
主要完成人	刘昭铁，何珍红，王伟涛，杨阳
主要完成单位	陕西师范大学，陕西科技大学

二、提名意见（适用于提各单位）

提 名 者	陕西省教育厅
<p>提名意见（不超过 600 字）：</p> <p>陕西省作为能源化工大省，拥有丰富的低碳烷烃资源，但同时碳排放量占比较大，开发利用 CO₂、低碳烷烃催化转化技术，对于减少温室气体排放，优化能源结构，降低对传统化石燃料的依赖，推动能源化工产业转型升级等方面具有重要意义。然而，CO₂ 和低碳烷烃具有高度的化学惰性，很难高效催化利用。本项目围绕 CO₂ 和低碳烷烃资源催化转化，开展了长期、原创性的工作，取得主要成果包括：（1）构建了 CO₂ 选择性吸附、活化增强策略，开发出 CO₂ 向 C₂+醇、C₅+烷烃的高效催化转化路径；（2）结合光-电-热外场，构建出多价态共存、富含缺陷位和异质界面等多功能催化剂，实现 CO₂ 高效转化；（3）开发出复杂工况下 CO₂ 和低碳烷烃 C-H 键活化技术，并发展利用 CO₂ 作为弱氧化剂实现丙烷氧化脱氢制备烯烃技术。该成果受到国内外专家学者的广泛认可，推动了该领域的发展。同时，部分技术进行了工业应用，取得了一定的经济效益，具有大规模产业化应用前景。</p> <p>鉴于本项目在科学研究和技术创新方面的突出表现，以及对国家能源战略和区域经济发展的积极贡献，特提名本项目申报陕西省自然科学奖。</p> <p>提名该项目为陕西省自然科学奖 二 等奖。</p>	
<p>说明：省科学技术奖一、二等奖项目，实行按等级标准提名、独立评审表决的机制。提名单者应严格依据省科学技术奖的标准条件，说明提名项目的贡献程度及等级建议。“提名一等奖”评审落选项目不再降格参评二等奖。项目组与提名单位沟通后，做出提名等级意见；提名项目提交后，提名等级建议不得变更。</p>	

三、项目简介

本项目属于化学工程技术领域。

陕西榆林地区是西北煤化工产业重镇，拥有丰富的低碳烷烃资源与大量工业 CO_2 废气，开发这些低碳烷烃和 CO_2 资源的高效利用技术，对保障国家能源战略安全、推动区域经济高质量发展、实现“碳达峰、碳中和”战略目标以及引领我国煤化工产业向绿色、低碳、高端化转型升级具有重要意义。将低碳烷烃资源催化转化成烯烃，以及将 CO_2 转化成甲烷、乙烯、 C_2 +醇、 C_5 +液体烷烃等高品质化学品及清洁能源是面向国家战略需求的重要课题。然而， CO_2 具有高热力学稳定性和化学惰性，同时低碳烷烃中 C-H 键不易活化，使得这些催化转化较为困难。设计高效催化体系是实现该目标的重要途径，同时也是当前研究的重点和难点课题之一。基于此，本项目在国家自然科学基金面上项目、陕西省重点研发计划等资助下，采用现代催化研究方法，开发出一系列高效催化体系，实现了将 CO_2 与低碳烷烃转化成 C_2 +醇、 C_5 +液体烷烃、 CH_4 、烯烃等高品质化学品；通过系统研究，揭示了反应过程中催化剂微观结构与宏观性能的对应关系；结合现代谱学与理论计算研究，厘清了 CO_2 、低碳烷烃分子在不同催化反应中涉及的中间体物种产生、演变、湮灭规律，揭示了不同反应中 CO_2 、丙烷分子活化与转化机制，提出了催化反应机理，为后续高效催化剂的设计开发提供了重要理论依据和实验基础。取得了以下主要创新性成果：

(1) 构建了 CO_2 选择性吸附、活化增强策略，开发出 CO_2 向 C_2 +醇、 C_5 +烷烃的高效催化转化路径

将 CO_2 催化转化制备含有两个碳原子及以上的 C_2 +液体醇和含有五个碳原子及以上的 C_5 +液体烷烃等重要化学品和能源产品，不仅涉及到 CO_2 分子还原，还涉及到 C-C 耦联，具有重要的理论意义和实际应用前景。通过构建功能化双金属催化剂如 Pt-Co、Co-Mn 及绿色催化体系，利用金属间相互作用，并借助溶剂效应，调控催化剂活性位点微环境，调节活性金属的电子结构以及催化剂表面的 C/H 比例，从而增强催化剂对 CO_2 、中间体分子的吸附活化作用，最终实现 CO_2 加氢制备 C_2 +醇、 C_5 +液体烷烃产品，为 CO_2 制备多碳化学品提供理论基础和实验支撑。

(2) 结合光-电-热外场，构建出多价态共存、富含缺陷位和异质界面等多功能催化剂，实现 CO_2 高效转化

通过调控催化剂的制备策略及条件，构建一系列具备多价态共存、特定形貌结构、特定晶面暴露等特征的功能型催化剂，包括具有光电响应特性的、多价态共存的 Co-Cu-Mn 三元催化剂和具有多界面、反转型 $\text{ZrO}_2/\text{Cu-Cu}_2\text{O}$ 催化剂等新型功能材料，诱导缺陷位生成，改善光电化学性质，促进 CO_2 分子吸附活化，实现 CO_2 还原生成 CH_4 、 C_2H_4 等重要化学品，为光-电-热外场耦合催化条件下催化剂设计构筑提供重要参考。

(3) 开发出复杂工况下 CO_2 和低碳烷烃 C-H 键活化技术，并发展利用 CO_2 作为弱氧化剂实现丙烷氧化脱氢制备烯烃技术

陕北榆林地区作为西北煤化工重镇，在煤化工生产过程中不可避免地伴生大量 CO_2 ，开辟其拥有的乙烷、丙烷等低碳烷烃资源与 CO_2 的高效利用途径，对推动区域经济高质量发展、

落实国家“双碳”战略、构建绿色低碳循环产业体系具有重大意义。针对这一资源特征，开发 CO₂ 氧化低碳烷烃脱氢制备烯烃技术，既可实现廉价资源的高值化利用，又能大规模转化 CO₂，兼具经济效益与减排功效，具有广阔的应用前景。然而，该反应体系面临诸多关键挑战，如 CO₂ 与低碳烷烃化学惰性分子难活化，引入 CO₂ 能一定程度上引发副反应，高温贫氢复杂工况条件下 CO₂ 转化困难，积碳难以避免，传统催化剂活性与稳定性不足等。针对这些难题，本项目开发出一系列 GaN/分子筛新型催化剂，能够有效催化 CO₂ 氧化丙烷脱氢制备丙烯和 CO。该类催化剂充分利用 GaN 优良的导热导电性能、对 CO₂ 与 C-H 键活化能力优异的特点，有效避免高温反应条件下局域热点形成，抑制催化剂烧结积碳。此外，通过系统研究，揭示了 Si-O-GaN-H 为催化活性中心，并从气体分子传质行为、酸碱性质、杂原子效应等多维度系统研究了活性中心的电子特性与构效关系，建立了反应性能的调控机制，提出了催化反应机理，为复杂工况条件下 CO₂ 和低碳烷烃催化转化奠定基础。

本成果的科学价值与应用意义在于：针对难活化的 CO₂、低碳烷烃等区域独有资源，开发了多种绿色、高效的催化体系；系统阐明了催化剂活性中心构型、微环境、酸碱性质、杂原子掺杂以及气体传质行为等因素对反应性能的调控机制，揭示了催化 CO₂、低碳烷烃分子吸附活化机制；拓展了针对 CO₂ 和低碳烷烃催化转化性能提升的有效策略。在应用技术层面，发展了适用于 CO₂ 转化、低碳烷烃高效转化的催化新过程，揭示了 CO₂ 在催化剂表面的吸附、活化行为与其微观结构之间的构效关系。在 GaN/分子筛催化体系的设计中，实现了 CO₂ 与低碳烷烃的共转化与资源化利用。本成果为 CO₂ 及低碳烷烃的高值化利用提供了有效的技术路径，对推动碳资源循环与绿色催化产业发展具有重要价值。

相关成果在 *Nat. Commun.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*PNAS*、*Chem*、*ACS Catal.*(3)、*Appl. Catal. B* (9)、*Green Chem.*(11)等国际著名期刊上发表论 100 多篇，在国际和国内学术会议上宣讲 20 多次。相关研究成果受到国内外同行专家的广泛认可与高度评价，五篇代表性研究论文总被引 500 次，其中他引 425 次。引用者当中有许多催化科学和化工领域著名专家领导的研究团队，如美国国家工程院陈经广院士、澳大利亚科学院乔世璋院士、华东师范大学何鸣元院士等国内外同行专家的广泛认可与高度评价，在 *Nat. Commun.*、*JACS*、*Chem. Rev.*、*Chem. Soc. Rev.*、*Chem* 等期刊对我们的研究成果进行 400 余次正面引用，体现出工作的原创性、前沿性和广泛认可度。另外，本成果申请中国发明专利 53 件，其中获授权 36 件。在“双碳”背景下，开发 CO₂ 和低碳烷烃资源的高效利用技术，符合国家战略需求，本项目成果为“双碳”目标的实现提供理论基础和可选途径，具有重要的科研价值和环保、经济、社会意义。

本项目所开发的“GaN/分子筛催化剂”在陕西晶格特催化科技有限公司应用于催化烷烃环己烷 C-H 键活化氧化，实现了转化，为企业获得了 1501 万元的利润。基于本项目创新点一，开发的“三元金属功能型催化剂”，在庆阳弘安工程技术有限责任公司中实现转化，自 2019 年应用至今，为企业创造 5399 万元利润，这些成果促进了地方经济社会的发展。

四、客观评价

本项目 5 篇代表性研究论文公开发表后, 受到国内外学术界广泛关注, 总被引次数 500 次, 其中正面他引 425 次, 其中包括在 *Nature Communications*, *Chemical Reviews*, *Chemical Society Reviews*, *Journal of the American Chemical Society*, *Chem* 等著名期刊论文, 体现出本成果的认可度。

(一) 代表性论文 1 和 2 的国际权威评价与验证

美国怀俄明州立大学 Maohong Fan 教授 2019 年发表在 *Nature Communications* 期刊的论文引用本项目中创新点一 (代表性论文 1), 称“何等报道了 Co_6/MnO_x 双金属纳米催化剂并利用 Co-Mn 相互作用, 实现催化 CO_2 转化率为 15.3%; C_5+ 烷烃选择性达 53.2%” (图 7a) (代表性引文 1)。

比利时根特大学 Mark Saeys 教授在著名综述类期刊 *Chemical Reviews* 上发表综述, 并评论本成果: “尽管钴基催化剂在二氧化碳加氢反应中的链增长活性较低, 但有研究报道, 一种 Co_6/MnO_x 催化剂的 C_5+ 选择性超过了 50%。研究表明, 该催化剂体系能够避免一氧化碳中间体的生成, 而是直接将二氧化碳转化为 CH_x^* 单体。这一结果是通过增强二氧化碳的吸附能力和减弱氢的吸附能力实现的, 从而得到了较高的碳氢表面比”(代表性引文 2)。

瑞士国家科研中心 (NCCR) 催化主任、*Green Chemistry* 期刊主编 Javier Pérez-Ramírez 教授在国际著名综述期刊 *Chemical Society Reviews* 上发表论文中 (图 7b), 整段评述本项目创新点一 (代表性论文 2): “何等人在水/1,3-二甲基-2-咪唑啉酮 (DMI) 悬浮的 $\text{Pt}/\text{Co}_3\text{O}_4$ 催化剂上进行了一系列 CO_2 加氢反应。进行了从 0.2 到 5 重量百分比的 Pt 负载量筛选, 发现 1 重量百分比的 Pt 负载量最适合生产高级醇 (HA)。在水存在条件下 (水/DMI=20/80), 总醇选择性达到了 33%, 其中 HA 的比例为 83%。逆水煤气变换 (RWGS) 反应几乎被完全抑制, 但甲烷的产率至少是总醇的两倍。”, “作者还通过使用 D_2O 和 $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$, 对反应中水和甲醇的作用获得了一些见解。研究表明水是氢气的来源, 甲醇有可能同系化为乙醇”(代表性引文 3)。英国牛津大学化学系教授, Wolfson 催化研究中心主任 Shik Chi Edman Tsang 教授在 *Chem* 期刊上发表论文评论本成果创新点一: “何等最近研究了 $\text{Pt}-\text{Co}_3\text{O}_4$ 催化二氧化碳加氢反应, 实验在搅拌罐式反应器中进行。在适宜的溶剂中, 最高高级醇 (HAS) 选择性达到了 30.4%, 这一结果优于在固定床反应器中测试的数据。在总醇产量中, 所期望的目标醇类范围占比为 82.5%”(代表性引文 4)。

(二) 针对代表性论文 3 和 4 的国际权威评价与验证

华东师范大学何鸣元院士在 *Nature Communications* 期刊上发表关于光热催化 CO_2 加氢制备 CH_4 的工作中 (图 8a), 应用并评论本项目中代表性论文 3 “刘等人报道, $\text{Co}_7\text{Cu}_1\text{Mn}_1\text{O}_x$ (200) 在 200 °C 时对 CO_2 加氢合成 CH_4 表现出活性, 其产率为 $14.5 \text{ mmol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$, 选择性为 85.3%”(代表性引文 5)。



图 7. 对本项目创新点 1 的部分评述

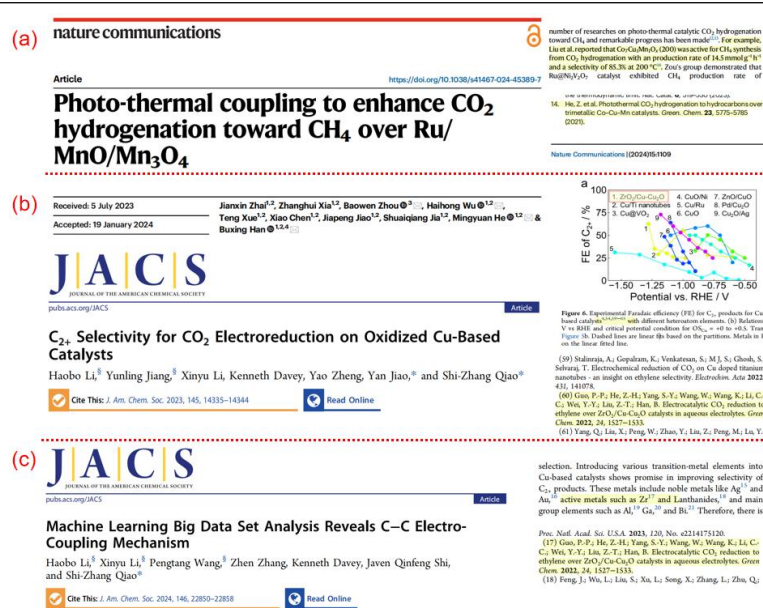


图 8. 对本项目创新点 2 的部分评述

(三) 针对代表性论文 5 的国际权威评价与验证

美国国家工程院院士、哥伦比亚大学陈经广教授在 *Trends in Chemistry* 期刊中综述本项目中创新点三代表性成果 5，“刘及其同事报道氮化镓（GaN）在 CO₂ 辅助的丙烷脱氢制丙烯（CO₂-ODHP）过程中表现出比其他报道的典型 Ga 基催化剂更佳的选择性和稳定性。GaN 中的不饱和配位的三价镓（Ga³⁺）物种作为路易斯酸位点，用于活化丙烷中的 C-H 键，形成丙烯和氢气，而氢气再与 CO₂ 发生逆水煤气变换（RWGS）反应”（图 9）（代表性引文 7）。

中国科学院大连化学物理所朱向学首席研究员发表在 *Chinese Journal of Catalysis* 期刊上的论文，系统地综述了本项目中 GaN/分子筛催化 CO₂ 氧化丙烷脱氢制备丙烯和 CO 的研究成果（代表性论文 5），并引用代表性论文 5 中的 Graphical Abstract，“为了提高 GaN/S-1 的活性，研究者们将 Fe 原子掺杂到 Silicalite-1 的框架中，以促进硅醇巢的生成。通过结合湿法浸渍和原位氮化的方法，将 GaN 纳米晶粒植入其中。在 5GaN/2000-Fe-硅铝石-1 上，尺寸最小的 GaN 纳米颗粒（2.7 ± 0.4 nm）展现出强大的抗烧结能力，这归因于其与 Fe-Silicalite-1 之间的强相互作用和限域效应。表征结果显示，GaN 纳米颗粒的尺寸可通过调节 Si/Fe 的摩尔比来调控，并且与丙烷的吸附和活化相关，而孤立的框架铁位点则负责 CO₂ 的活化（见图 13）。在 GaN/Fe-Silicalite-1 上发生的 CO₂ 辅助氧化丙烷脱氢（CO₂-ODHP）反应涉及一个两步耦合反应过程”（代表性引文 8）。

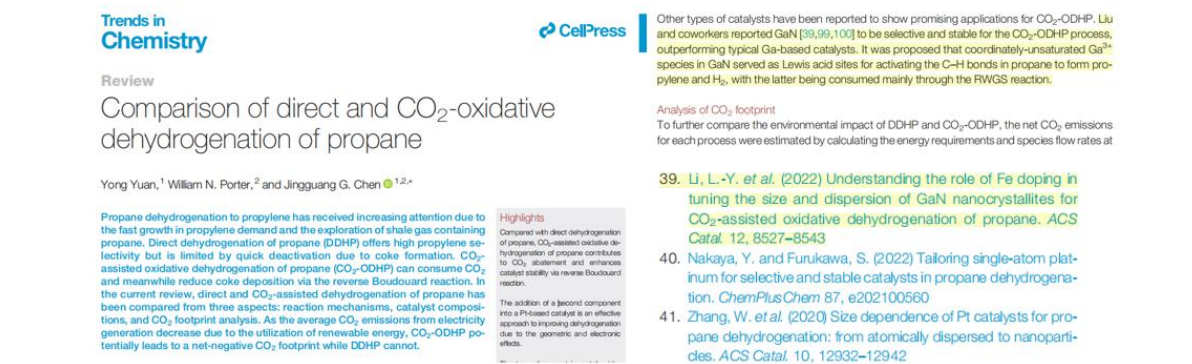


图 9. 对本项目创新点 3 的部分评述

澳大利亚科学院院士乔世璋教授近期在 *Journal of the American Chemical Society* 期刊上发表的关于氧化态 Cu 基催化剂对 C₂+选择性的研究论文引用了本项目中代表性论文 4 开发的 ZrO₂/Cu-Cu₂O 催化剂作为模型催化剂之一（图 8b）进行理论计算（代表性引文 6）。此外，乔教授在同一期刊上发表的另一篇论文中，利用机器学习策略快速扩展量子化学计算数据，探索了二氧化碳电催化还原过程中 C-C 偶联的反应机理，采用该 Cu-Zr 催化剂作为大数据分析的材料（图 8c）。

五、代表性论文专著目录

(不超过 8 条。其中代表性论文不超过 5 篇，代表性专著不超过 3 部，应公开发表 2 年以上，即 2023 年 8 月 1 日前)

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)	国内作 者	他引 总次 数	检索数 据库	知识产权是 否归国内所 有
1	Synthesis of Liquid Fuel via Direct Hydrogenation of CO ₂	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	Zhenhong He, Meng Cui, Qingli Qian, Jingjing Zhang, Huizhen Liu, and Buxing Han	2019, 116(26), 12654-12659	2019.06.25	Qingli Qian, Buxing Han,	Zhenhong He	何珍红, 崔萌, 钱庆利, 张静静, 刘会贞, 韩布兴	129	WOS 核心合集	是
2	Water-Enhanced Synthesis of Higher Alcohols from CO ₂ Hydrogenation over a Pt/Co ₃ O ₄ Catalyst under Milder Conditions	Angewandte Chemie-International Edition	Zhenhong He, Qingli Qian, Jun Ma, Qinglei Meng, Huacong Zhou, Jinliang Song, Zhimin Liu, Buxing Han	2016, 55, 737-741	2016.01.11	Buxing Han	Zhenhong He	何珍红, 钱庆利, 马珺, 孟庆磊, 周华从, 宋金良, 刘志敏, 韩布兴	202	WOS 核心合集	是

3	Photothermal CO ₂ hydrogenation to hydrocarbons over trimetallic Co-Cu-Mn catalysts	Green Chemistry	Zhen-Hong He, Zhu-Hui Li, Zhong-Yu Wang, Kuan Wang, Yong-Chang Sun, Sen-Wang Wang, Wei-Tao Wang, Yang Yang, Zhao-Tie Liu	2021,23, 5775-5785	2021.08.21	Zhen-Hong He, Zhao-Tie Liu	Zhen-Hong He	何珍红, 李竹惠, 王忠宇, 王宽, 孙永昌, 王森望, 王伟涛, 杨阳, 刘昭铁	32	WOS 核心合集	是
4	Electrocatalytic CO ₂ reduction to ethylene over ZrO ₂ /Cu-Cu ₂ O catalysts in aqueous electrolytes	Green Chemistry	Pan-Pan Guo, Zhen-Hong He, Shao-Yan Yang, Weitao Wang, Kuan Wang, Cui-Cui Li, Yuan-Yuan Wei, Zhao-Tie Liu, Buxing Han	2022,24, 1527-1533	2022.2.21	Zhen-Hong He, Zhao-Tie Liu, Buxing Han	Pan-Pan Guo	郭攀攀, 何珍红, 杨少妍, 王伟涛, 王宽, 李翠翠, 魏园园, 刘昭铁, 韩布兴	50	WOS 核心合集	是

5	Understanding the Role of Fe Doping in Tuning the Size and Dispersion of GaN Nanocrystallites for CO ₂ -Assisted Oxidative Dehydrogenation of Propane	ACS Catalysis	Long-Yao Li, Zhong-Yu Wang, Shao-Yan Yang, Jian-Gang Chen, Zhen-Hong He, Kuan Wang, Qun-Xing Luo, Zhong-Wen Liu, Zhao-Tie Liu	2022, 12 (14), 8527–8543	2022.07.15	Jian-Gang Chen, Qun-Xing Luo, Zhao-Tie Liu	Long-Yao Li	李龙耀, 王忠宇, 杨少妍, 陈建刚, 何珍红, 王宽, 罗群兴, 刘忠文, 刘昭铁	12	WOS 核心合集	是
6											
7											
8											
合 计									425		
补充说明（视情填写）:											

六、主要完成人情况表

姓 名	刘昭铁	排 名	1
行政职务		技术职称	教授
工作单位	陕西师范大学	完成单位	陕西师范大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>在项目研究过程中，全面规划研究方向与实施路径，统筹项目执行细节并提供专业指导与关键决策。协调与其他合作单位的工作进度与合作关系。全程把控项目进度，精准攻克技术难题，深入剖析实验数据，对项目理论探索和技术落地的成功实施发挥核心引领作用。对创新点二、三有贡献（代表性论文 3、4、5）。</p>			

姓 名	何珍红	排 名	2
行政职务	无	技术职称	教授
工作单位	陕西科技大学	完成单位	陕西科技大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>负责项目实施过程中实验方案设计、技术路线规划及调整，实验数据分析、表征及测试、机理推测。对创新点一、二、三有贡献（代表性论文 1、2、3、4、5）。</p>			

姓 名	王伟涛	排 名	3
行政职务	副院长	技术职称	副教授
工作单位	陕西科技大学	完成单位	陕西科技大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>负责项目实施过程中实验方案制定与调整、实验数据分析、动力学研究、表征测试结果分析、软件处理以及机理讨论。对创新点二有贡献（代表性论文 3、4）。</p>			

姓 名	杨阳	排 名	4
行政职务		技术职称	副教授
工作单位	陕西科技大学	完成单位	陕西科技大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>负责项目实施过程中实验方案，实验数据分析、表征及测试、机理推测。对创新点二有贡献（代表性论文 3）。</p>			

七、主要完成单位情况表

单位名称	陕西师范大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>作为项目的依托单位，陕西师范大学为本项目的顺利完成做出了重要贡献，主要表现为：</p> <ul style="list-style-type: none">（1）组织并完成项目策划、技术路线制定与修订和项目实施等工作；（2）提供了项目所需的实验设备、分析测试、计算机算力资源等条件；（3）为项目的顺利实施提供了人力资源、管理、场所等支持。	

单位名称	陕西科技大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>作为本项目的重要参与单位，陕西科技大学为本项目的顺利完成做出了贡献，主要包括：</p> <ul style="list-style-type: none">（1）项目实施过程中，提供人力资源和智力支持，完成部分实验、数据分析、结论讨论等重要工作；（2）提供了项目实施过程中所需的部分实验设备、测试平台等支持；（3）提供了本项目所需的能源、图书资料、数据库等支持。	

八、完成人合作关系说明

本项目主要完成人刘昭铁与何珍红、王伟涛、杨阳合作完成代表性论文 3；刘昭铁与何珍红、王伟涛合作完成代表性论文 4；刘昭铁与何珍红完成代表性论文 5。

完成人合作关系情况汇总表

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作时间	合作成果	证明材料
1	论文合著	何珍红（2）	2019年6月	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2019, 116(26), 12654-12659	代表性论文 1
2	论文合著	何珍红（2）	2016年1月	Angewandte Chemie-International Edition, 2016, 55, 737-741	代表性论文 1
3	论文合著	刘昭铁（1），何珍红（2），王伟涛（3），杨阳（4）	2021年6月	Green Chemistry, 2021, 23, 5775-5785	代表性论文 3
4	论文合著	刘昭铁（1），何珍红（2），王伟涛（3）	2022年1月	Green Chemistry, 2022, 24, 1527-1533	代表性论文 4
5	论文合著	刘昭铁（1），何珍红（2）	2022年7月	ACS Catalysis, 2022, 12, 8527-8543	代表性论文 5
6	共同获奖	刘昭铁（1），何珍红（2），王伟涛（3），杨阳（4）	2024年6月	陕西高等学校科学技术奖一等奖	陕西高等学校科学技术研究成果一等奖
7	共同立项	刘昭铁（1），何珍红（2），王伟涛（3）	2022年6月	陕西省科技计划项目——重点产业创新链（群）—工业领域	项目验收证明