前言: 聚焦精准催化的烃科学与技术 前沿论坛专刊

烃是汽油、柴油等液体燃料、基本有机原料及“三大合成材料”单体的重要组成部分, 支撑了人类社会的发展与变革, 保障了人类的衣食住行等日常生活所需. 烃的转化是石油炼制、石油化工、煤化工等行业的基础, 其主要涉及烃加工、烃合成、烃衍生、烃聚合等过程. 面对资源短缺与环境恶化的双重挑战, 社会经济日益旺盛的烃需求, 以及“原料多元化、过程绿色化、产品高端化”的行业发展目标, 亟需开发原子经济的高选择性烃转化技术. 研究烃转化过程中化学键重构的关键科学问题与技术方法, 即为“烃科学与技术”.

催化还原、催化氧化、酸催化等催化反应与工程技术一直以来是实现烃类高效转化的重要手段, 但由于人们对这类催化过程的本质缺乏深入的认识和了解, 实现的催化过程还远未达到精准, 仍有许多反应过程未能实现原子经济, 如在甲烷/合成气的催化转化、烃的催化选择性氧化、高分子材料的可控聚合等反应中提高目标产物的选择性、抑制副反应一直是科学家矢志追求的目标以及研究焦点与科学前沿. 为此, 需要建立以“精准催化”为目标的理论体系与技术方法, 通过化学键的定向活化, 实现目标产物原子经济性的精准合成. 其主要包括基于反应预测的计算化学模拟、基于化学键定向活化的催化材料创制, 基于目标产物高选择性合成的反应路径选择等. 近年来, “精准催化”已取得诸多突破性的进展, 相继发展了诸多催化结构理性设计方法, 纳米催化、限域催化、单原子催化、形貌择向等新结构催化剂, OX-ZEO反应耦合、变径反应器等反应路径控制策略的催化新理念与新技术, 推动了“烃科学与技术”的发展.

2019年9月, 我们共同担任论坛主席, 在上海主持召开了中国科学院学部第97次“科学与技术前沿论坛”. 本次论坛依托“烃加工与烃合成的催化科学技术前沿”中国科学院学部学科发展战略研究学术交流项目, 以“聚焦精准催化的烃科学与技术前沿”为主题, 邀请多学科跨领域的专家学者, 面向烃转化技术的发展目标与需求, 围绕4个中心议题: (1) 烃加工: 资源高效利用与高值化; (2) 烃合成: 能源转型的基础; (3) 烃衍生: 高端化学品的绿色合成; (4) 烃聚合: 高性能材料关键技术的突破. 结合国内外“精准催化”的研究现状、发展趋势和面临的挑战, 进行多学科交叉、高层次深度的学术研讨, 展望我国“烃科学与技术”的战略发展, 进一步完善“精准催化”的理论体系与技术方法.

与会专家共同凝练烃类资源高效利用与原料多元化制备烃类化合物过程的关键催化技术、科学问题及发展方向, 形成具有共性和引导性的科研思路和指导方案, 启发开展开创性工作, 催生变革性技术的产生. 精准催化的概念初步凝练为三方面内容, 即活性位精准设计与催化材料合成、反应路径的精准控制、反应工程的精准控制. 从工业过程看精准催化的关键科学问题, 需要着重关注“宏观与微观”、“系统与基元”、“表观与本征”等重要因素的协同. 当前全球都在开展精准催化的研究工作, 但还没有形成系统概念. 面向未来, 精准催化的理论体系与技术方法需要从事催化的科技工作者一起努力实现. 同时, 充分认识我国在高附加值聚合物单体等高端化学品绿色合成及其下游高性能材料聚合等领域的短板, 从当前需求与未来预期两个层面共同梳理“卡脖子”技术, 寻找突破方向, 力争在部分领域达到世界先进水平.

引用格式: Bao X, Ding K, He M, Xie Z. Preface: Progress of precisely catalytic sciences and technologies of hydrocarbons. *Sci Sin Chim*, 2020, 50: 729–731, doi: 10.1360/SSC-2020-0088

依托该论坛,《中国科学: 化学》组织出版了本期“聚焦精准催化的烃科学与技术前沿论坛”专刊。内容涉及 CH_4 - CO_2 重整技术、 CO_2 接力催化转化及制备生物降解塑料、低碳烷烃均相转化及脱氢制烯烃、沉淀聚合、脂肪烃的合成方法及规模化、丙交酯立体选择聚合等方面的论述,期望读者能从本专刊中获得精准催化的烃科学与技术的新信息和新认知。由于版面的限制,专刊未能全面覆盖我国在烃科学与技术领域的研究工作,对此深表歉意。

包信和, 丁奎岭, 何鸣元, 谢在库

包信和, 1982年毕业于复旦大学化学系, 1987年获复旦大学博士学位。曾在德国马普学会Fritz-Haber研究所任访问学者。2009年当选为中国科学院院士。先后担任中国科学院大连化学物理研究所所长、中国科学院沈阳分院院长和复旦大学常务副校长, 现任中国科学技术大学校长。主要从事能源高效转化相关的表面科学和催化化学基础研究, 以及新型催化剂研制和新催化过程的开发工作。与同事们一起提出了“纳米限域催化”概念, 系统研究了纳米限域体系中催化剂活性中心结构、电子特性和催化性能的控制规律。创制晶格限域的单中心铁催化剂, 实现了甲烷无氧转化直接制烯烃和高值化学品; 首创氧化物和分子筛纳米复合催化剂和催化过程, 成功实现煤基合成气一步转化直接制低碳烯烃, 为碳基资源的高效、清洁利用开辟了新途径。曾获国家自然科学基金二等奖、中国科学院杰出科技成就奖、周光召基金会基础科学奖、中国化学会-中国石油化工股份有限公司化学贡献奖、陈嘉庚化学科学奖, 以及国际天然气转化杰出成就奖和德国催化协会催化成就奖等。

丁奎岭, 中国科学院上海有机化学研究所研究员。1985年毕业于郑州大学化学系, 1990年于南京大学化学系获博士学位。曾任中国科学院上海有机化学研究所所长, 现任上海交通大学常务副校长。2013年当选为中国科学院院士。主要从事基于有机金属催化的不对称反应和绿色化学研究, 提出并成功实践了手性催化剂设计的自负载新理念和组合化学新方法, 发展了具有特色骨架的新型手性配体与催化剂, 开拓了二氧化碳资源化利用的新途径。将基础研究与实际应用紧密结合, 多项专利成果授权企业使用并实现了产业化。先后获国家自然科学基金二等奖、上海市自然科学牡丹奖、上海市科技精英、Eli Lilly Scientific Excellence Award in Chemistry、日本国际有机化学基金会(IOCF) Yoshida Prize和德国Humboldt Research Award等奖励和荣誉。

何鸣元, 1961年毕业于华东纺织工学院应用化学专业。中国石油化工集团公司石油化工科学研究院总工程师, 华东师范大学化学系教授。1995年当选为中国科学院院士。主要致力于将科学认识与技术应用相结合, 在炼油化工催化材料领域形成创新和发明。发明了一系列沸石合成与改性的新方法并开发出多种炼油催化剂, 为解决我国重油裂化、提高催化裂化汽油辛烷值、新标准汽油生产等技术难题作出了贡献。其中ZRP系列分子筛于1995年被国家科学技术委员会评为我国十大科技成就之一。曾获国家发明奖二等奖、中国石油化工集团总公司发明奖一等奖、科技进步奖一等奖等。

谢在库, 中国石油化工股份有限公司教授级高级工程师。1985年毕业于抚顺石油学院, 2000年于华东理工大学获博士学位。2017年当选为中国科学院院士。现任中国石油化工集团科技委常务副主任、科技部主任。主要从事催化基础和应用的研究。提出了分子筛工业催化剂设计中“孔道择形与分子扩散协同”理念, 发展了多级孔构筑和形貌控制系统合成方法和工艺技术, 合成了系列新型分子筛工业催化材料。从获取反应机理新认识出发, 聚焦于复杂反应体系中选择催化的实现, 基于新型多级孔分子筛催化材料, 开发了烯烃和芳烃合成的多项催化新技术并实现工业化。曾获国家科技进步一等奖、技术发明二等奖、中国专利金奖、何梁何利产业创新奖等。