

上海市分子催化和功能材料重点实验室

2022 年度报告

一、实验室简介和研究方向

实验室简介	<p>上海市分子催化和功能材料重点实验室以复旦大学化学系的“物理化学”和“无机化学”全国重点学科为主体,组合了相关优势力量组建而成。实验室于 2002 年获批建设,2004 年通过验收,已历经 4 次评估,除 2012 年获评良好以外,2008、2015 和 2018 年均获评优秀。实验室现有固定研究人员 59 人,包括教授 46 人,副教授 2 人,青年研究员 11 人,均具有博士学位。另有大型仪器管理人员 3 人,专职秘书 1 人。</p> <p>实验室侧重在以下方向开展研究工作:(1)多孔及纳米材料的制备科学和应用,(2)多相催化,(3)理论催化和催化反应机理的研究,(4)新型储能材料、电催化及界面电化学。每个研究方向均由院士、杰出青年基金获得者领衔,其中介孔材料研究处于国际领先地位;新型储能材料研究处于国内领先水平。实验室在基础研究方面取得了令人瞩目的成绩。近五年来,实验室成员荣获国家自然科学基金一等奖 1 项、二等奖 1 项;教育部自然科学一等奖 2 项,上海市自然科学一等奖 2 项、二等奖 2 项。实验室聚焦能源材料化工过程基础研究,以介观功能材料为中心,加强产-学-研结合,努力成为连接上海地区高校-化工重大产业集团的“桥梁”之一,为上海化工的可持续发展及新能源及其高效利用的研发提供强有力支撑。并且希望发挥基础研究的优势,面向国民经济主战场,在较短时期内取得一批具有开创性、居于国际领先水平的科研成果,将实验室建设成为具有国际先进水平、若干领域处于国际领先地位、科研力量雄厚的催化和相关材料研究实验室和人才培养基地,实现建设成为国家级重点实验室的重要目标。</p>	
主要研究方向	序号	研究方向
	1	多孔及纳米材料的制备科学和应用
	2	多相催化
	3	理论催化和催化反应机理的研究
	4	新型储能材料、电催化及界面电化学

二、典型案例

1	<p>郑耿锋和徐昕教授合作团队报道了一种具有铜钯原子间隔有序排列的 CuPd 金属间化合物作为一氧化碳还原 (CORR) 电催化剂, 获得了对乙酸产物的高活性、高选择性与高稳定性。乙酸是多种聚合物、食品和药品生产中常用的化工原料。近年来, 电化学一氧化碳还原反应 (CORR) 成为制备乙酸的一种极具潜力的途径。然而, 目前电化学 CORR 制备乙酸的分电流密度低于 $200 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$, 限制了电化学 CORR 制备乙酸的进一步发展。因此, 设计与合成高效 CORR 反应电催化剂以实现高选择性、高电流密度、高稳定性的乙酸制备具有重要的基础研究价值与应用前景。针对上述问题, 团队开发了一种具有铜-钯原子间隔有序排列的金属间化合物 CuPd, 高密度、高有序度的 Cu-Pd 原子对有效提高了催化剂表面一氧化碳中间体的吸附覆盖度, 稳定了乙酸反应路径中的关键中间体——乙烯酮, 有效抑制了析氢反应的发生, 促进乙酸的生成。结合密度泛函理论计算、簇展开方法及动力学蒙特卡洛模拟等结果, 发现无论是在合金的体相还是表面, 具有有序交替排列的 Cu-Pd 原子对都是最稳定的结构, 即使在高 CO 中间体的吸附覆盖度下, 最稳定表面也未发生偏析。团队使用该 CuPd 催化剂在流动电解池中进行了 CORR 测试, 实现了~70%的乙酸法拉第效率以及 $425 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的乙酸分电流密度, 乙酸的生成速率达到 $1.1 \mu\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{cm}^{-2}$, 相比之前报道的最佳活性提高了 2 倍以上。在膜电极组装电解池中, 使用该 CuPd 催化剂, 以 $500 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的总电流密度连续进行 500 小时的 CO 电还原反应, 乙酸的法拉第效率维持在~50%。反应后的结构表征表明, 该 CuPd 催化剂仍保持 Cu 和 Pd 原子高度有序交错排列的结构, 具有优异的结构稳定性。研究工作发表于国际顶级期刊 Nature Catalysis, 国家基金委主页报道了此成果。</p>
2	<p>2022 年度, 赵东元院士团队全面展开了功能介孔材料基础科学中心建设, 大力推进宝山功能介孔材料在能源、电子、绝热和日化等方面的产业化研发进度, 实现了样品化示范生产。实验平台建设稳步推进, 上海宝山介孔谷新材料研发中心、济南介孔谷产业技术研究中心和上海生物医学检测试剂工程技术研究中心三个产业转化项目进展顺利。团队发明了独特的核-壳功能结构的介孔@微孔沸石分子筛复合催化剂, 并实现千吨级工业生产, 成功应用到石油化工的重原油加氢裂化工业中。团队与中石化密切合作, 在齐鲁石化建了 56 万吨/年加氢裂化工业装置, 所开发的新一代牌号介孔催化剂 (FC-38) 可以实现中间馏分油收率大幅提升 (>1.5%), 技术在全国推广, 可增产 150 万吨/年优质航煤和柴油, 创造近百亿元经济效益, 为缓解石油进口、能源短缺做出重要贡献。在此基础上团队进一步发展了界面组装技术, 创制了等级孔催化剂, 用于</p>

异构化、磁稳定床乙醇脱水催化、劣质渣油加氢裂化工业中，已建成 50 万吨沸腾床渣油裂化示范装置，已成功运行一年半，为我国石油化工、化学化工发展做出了应有的贡献。团队还创造性制备了碳包覆空心介孔氧化硅纳米球，实现了工业化生产。该纳米球作为低介电常数材料可以直接与高分子树脂复合，成功地用于印刷电路板的生产，将环氧树脂类覆铜板的介电常数从 4.5 降至 3.0，并且降低能量损耗近 20%，目前正在海宁千吨级生产，打破了该领域长期以来被国外技术垄断的局面，并可以广泛用于电子封装材料、增韧材料，促进了我国高新技术电子信息领域的发展。团队还与西安凯立公司联合开发钨/介孔碳催化剂，实现了规模化生产，已被推广应用于精细化工、医药等领域，产生了良好的经济效益。

三、代表性文章列表

序号	发表时间	论文名称	作者	署名排序	刊物	卷、期、页	期刊级别	是否标注实验室
1	2022-04	Selective CO-to-acetate electroreduction via intermediate adsorption tuning on ordered Cu-Pd sites	Ji, Yali; Chen, Zheng; Wei, Ruilin; Yang, Chao; Wang, Yuhang; Xu, Jie; Zhang, Hao; Guan, Anxiang; Chen, Jiatang; Sham, Tsun-Kong; Luo, Jun; Yang, Yaoyue; Xu, Xin*; Zheng, Gengfeng*	通讯作者	Nat. Catal.	5(4), 251-258	EI/SCI 收录 (国外)	是
2	2022-06	A deep tissue optical sensing	Lu, Lingfei; Zhang, Fan*	通讯作者	Nat. Nanotechnol.	17(6), 566-568	EI/SCI 收录 (国外)	是
3	2022-03	Dimensional Design and Core-Shell Engineering of Nanomaterials for Electromagnetic Wave Absorption	Wu, Zhengchen; Cheng, Han-Wen; Jin, Chen; Yang, Bintong; Xu, Chunyang; Pei, Ke; Zhang, Huibin; Yang, Ziqi; Che, Renchao*	通讯作者	Adv. Mater.	34(11), 2107538	EI/SCI 收录 (国外)	是
4	2022-07	Unusual Mesoporous Titanium Niobium Oxides Realizing Sodium-Ion Batteries Operated at -40°C	Liang, Haichen; Liu, Liangliang; Wang, Nan; Zhang, Wei; Hung, Chin-Te; Zhang, Xingmiao; Zhang, Zhenghao; Duan, Linlin; Chao, Dongliang; Wang, Fei; Xia, Yongyao; Li, Wei*; Zhao, Dongyuan	通讯作者	Adv. Mater.	34(28), 2202873	EI/SCI 收录 (国外)	是

5	2022-08	Super-Assembled Chiral Mesostuctured Heteromembranes for Smart and Sensitive Couple-Accelerated Enantioseparation	Huang, Yanan; Zeng, Hui; Xie, Lei; Gao, Ruihua; Zhou, Shan; Liang, Qirui; Zhang, Xin; Liang, Kang; Jiang, Lei; Kong, Biao*	通讯作者	J. Am. Chem. Soc.	144(30), 13794-13805	EI/SCI 收录 (国外)	是
6	2022-11	A Two-Dimensional van der Waals Heterostructure with Isolated Electron-Deficient Cobalt Sites toward High-Efficiency CO ₂ Electroreduction	Gu, Huoliang; Shi, Guoshuai; Zhong, Lixiang; Liu, Lingmei; Zhang, Honghao; Yang, Chunlei; Yu, Ke; Zhu, Chenyuan; Li, Jiong; Zhang, Shuo; Chen, Chen; Han, Yu; Li, Shuzhou; Zhang, Liming*	通讯作者	J. Am. Chem. Soc.	144(47), 21502–21511	EI/SCI 收录 (国外)	是
7	2022-07	Methanol Synthesis from CO ₂ /CO Mixture on Cu-Zn Catalysts from Microkinetics-Guided Machine Learning Pathway Search	Shi, Yun-Fei; Kang, Pei-Lin; Shang, Cheng*; Liu, Zhi-Pan*	通讯作者	J. Am. Chem. Soc.	144(29), 13401-13414	EI/SCI 收录 (国外)	是
8	2022-04	Gradient Hierarchically Porous Structure for Rapid Capillary-Assisted Catalysis	Hung, Chin-Te; Duan, Linlin; Zhao, Tiancong; Liu, Liangliang; Xia, Yuan; Liu, Yupu; Qiu, Pengpeng; Wang, Ruicong; Zhao, Zaiwang; Li, Wei*; Zhao, Dongyuan*	通讯作者	J. Am. Chem. Soc.	144(13), 6091-6099	EI/SCI 收录 (国外)	是

9	2022-03	Steering the Glycerol Electro-Reforming Selectivity via Cation-Intermediate Interactions	Wu, Jianxiang#; Li, Jili#; Li, Yefei*; Ma, Xian-Yin ; Zhang, Wei-Yi; Hao, Yaming; Cai, Wen-Bin; Liu, Zhi-Pan; Gong, Ming*	通讯作者	Angew. Chem. Int. Ed.	61(11), e202113362	EI/SCI 收录 (国外)	是
10	2022-03	Sodium-Ion Battery with a Wide Operation-Temperature Range from -70 to 100 °C	Li, Zhi; Zhang, Yu; Zhang, Jianhua; Cao, Yongjie; Chen, Jiawei; Liu, Haimei; Wang, Yonggang*	通讯作者	Angew. Chem. Int. Ed.	61(13), e202116930	EI/SCI 收录 (国外)	是

四、年终总结

研究成果	<p>实验室围绕国家重大战略需求，在多相催化，多孔纳米材料的制备科学和应用，理论催化和催化反应机理研究，以及新型储能材料、电催化及界面电化学等研究方向上开展基础和应用研究。2022 年度共获批 47 项国家和省部级科研项目、17 项企业合作项目，包括国家重点研发计划 6 项（其中 1 项为项目首席）、基金委重点项目 2 项、重大研究计划 2 项、杰出青年基金项目 1 项。年度总到款经费 6578 万元。共发表实验室署名的 SCI 论文 359 篇，其中第一单位论文 266 篇，包括 Chem. Soc. Rev. 1 篇，Nat.Catal. 1 篇，Nat. Nanotechnol. 1 篇，Adv. Mater. 8 篇，JACS 18 篇。新增授权专利 77 项。实验室重视成果转化和应用研究，2022 年度有 2 项专利实现成果转让。同时，实验室大力推进功能介孔材料在能源、电子、绝热和日化等方面的产业化研发进度，实现了样品化示范生产。创制了等级孔催化剂，用于异构化、磁稳定床乙醇脱水催化、劣质渣油加氢裂化工业中；制备了碳包覆空心介孔氧化硅纳米球，实现工业化生产，作为低介电常数材料可以直接与高分子树脂复合，成功用于印刷电路板的生产，将环氧树脂类覆铜板的介电常数从 4.5 降至 3.0，并且降低能耗近 20%，已在海宁千吨级生产，打破了该领域长期被国外技术垄断的局面；与西安凯立公司联合开发钨/介孔碳催化剂，实现了规模化生产，已被推广应用于精细化工、医药等领域，产生了良好的经济效益。</p>
队伍建设与人才培养	<p>实验室现有固定人员 63 人，包括固定研究人员 59 人，大型仪器管理人员 3 人，专职秘书 1 人。固定研究人员均具有博士学位，60 岁以上占 3%，40-60 岁成员占 75%，40 岁以下 22%，年龄结构合理。实验室主任为中科院院士，四个方向的学术带头人均为杰青或长江特聘教授。实验室注重骨干人才培养，张凡教授获 2022 年度科学探索奖，周鸣飞教授获第十七届上海市科技精英提名奖，李伟教授获第十一届上海青年科技英才。2022 年度，实验室培育杰青 1 名，海外优青 2 名。博士后出站 22 人，培养博士研究生 39 人，硕士研究生 21 人。24 位新进站的博士后中，有 3 人入选国家博新计划，8 人入选上海市超级博士后计划，14 人入选校级超级博士后计划，博士后成为实验室科研队伍中不可或缺的生力军。</p>

开放交流与运行管理	2022 年度有 7 项开放课题在研，共发表有实验室署名的开放课题论文 10 篇，开放效果良好。有 3 个课题顺利结项。实验室仪器设备运行正常，有 15 台大型仪器加入市科委研发共享平台，服务上海和长三角区域，其中有 7 台大型仪器参与对外服务。受疫情影响，本年度实验室成员承办或参加的学术会议有所减少，但仍通过线上办会、线上参会等渠道与国内外同行开展广泛的学术交流。与美国化学会出版部共同主办了 1 次学术研讨会。成员参加国内外重要学术会议并受邀做报告 44 人次。获批 4 项国家基金委或上海市的国际合作项目。实验室参照国家重点实验室的管理机制，建立了完整的规章制度并认真执行。实验室主任负责实验室的总体管理工作，实验室配备 1 名专职秘书负责日常行政管理工作。
依托单位支撑和保障情况	依托单位复旦大学持续在建设运行经费、实验室场地、人才引进及团队建设等多方面给予大力支持，保障实验室的顺利运行。