

2025年

第01

期

先进制造 与新材料

ADVANCED MANUFACTURING
& NEW MATERIALS BRIEFING



上海科学技术情报研究所
上海市前沿技术发展研究中心
技术与创新支持中心(TISC)

催化剂领域研究与应用最新进展

编者按

催化科学作为推动能源转型和绿色化工发展的关键技术领域，近年来迎来跨学科创新与技术突破的黄金期。在基础研究方面，美国科学家开发加速单原子催化剂结构分析的软件和多模态机器学习模型，为优化催化剂设计提供更高效的手段；德国科学家揭示MXene和镍基催化剂的催化机理，为新材料的低成本生产和性能提升提供理论支持。在应用层面，美国和德国团队分别在温室气体清洁转化和水分解制氢领域取得突破，为清洁能源开发和碳中和目标的实现提供新思路。同时，韩国研究人员通过创新技术快速评估氢燃料电池催化剂的耐久性，推动燃料电池商业化进程。

本期简报聚焦催化科学领域的重要进展与挑战，希望为读者提供更加深入的思考与启发。

目录

基础研究.....	1
加速单原子催化剂研究的突破性软件.....	1
多模态机器学习模型提升催化剂筛选精度.....	2
迈科烯 (MXene) 表面结构的催化潜力.....	3
应用.....	5
美国通过催化剂寿命延长技术助力温室气体清洁转化.....	5
德国通过自旋驱动晶体显著提高水分解效率.....	6
韩国研发出快速评估氢燃料电池催化剂耐久性的创新技术.....	7
催化机理.....	8
德国科学家揭示镍基催化剂在电催化二氧化碳还原中的工作机制	8

基础研究

加速单原子催化剂研究的突破性软件

斯坦福大学的研究团队与美国能源部 SLAC 国家加速器实验室合作，成功推出一款名为 MS-QuantEXAFS 的软件工具，这一创新性工具在单原子催化剂研究领域具有革命性的意义。研究中，团队通过结合密度泛函理论（DFT）与扩展 X 射线吸收精细结构（EXAFS）技术，显著提升分析单原子催化剂活性位点结构的效率。与以往依赖人工逐步计算的方式相比，该软件不仅能够大幅缩短分析时间，从数日减至一夜，而且具备更高的精准度和自动化水平，为相关研究提供更高效的解决方案。

具体而言，MS-QuantEXAFS 软件可以在分析催化剂中单原子与纳米颗粒的比例分布时，快速、全面地生成结构信息，为优化催化剂的设计提供基础支持。通过借助这一工具，研究者能够深入理解单原子催化剂中的活性位点结构及其在化学反应中的行为表现，从而加快研发高性能催化剂的步伐。研究团队进一步指出，该工具具备模块化的设计特点，能够满足不同用户的需求，并允许进行功能的定制化开发，使其在科学研究、教学培训乃至工业应用中都能发挥广泛作用。

这一工具的诞生为单原子催化剂研究打开了新的大门，标志着该领域迈入一个更高效、更智能的阶段。单原子催化剂因其具有高活性、高选择性和低材料消耗等优势，近年来受到广泛关注。然而，其复杂的结构和异质性也使得传统方法难以快速、精准地解析其活性位点。MS-QuantEXAFS 软件通过整合先进

的理论计算和实验数据分析技术，有效解决这一难题。与此同时，研究人员还计划进一步优化该软件的性能，使其适用于更复杂的催化剂体系分析，并探索其在工业催化剂设计中的潜在应用。

从更宏观的角度来看，这一工具的应用将不仅局限于单原子催化剂领域，还可能对整个材料科学研究产生深远影响。其高效的算法和分析能力能够为其他复杂体系（如多组分催化剂或异质材料）提供新思路，助力实现更广泛的能源和化工技术创新。在全球能源转型和碳中和背景下，这样的技术进步无疑具有重要意义。

资料来源：Rana, Rachita & Hong, Jiyun & Hoffman, Adam & Werghi, Baraa & Bare, Simon & Kulkarni, Ambarish. (2024). Quantifying the Site Heterogeneities of Non-Uniform Catalysts Using QuantEXAFS. Chemistry - Methods. 5. 10.1002/cmtd.202400020.

多模态机器学习模型提升催化剂筛选精度

卡内基梅隆大学的研究团队开发一种基于多模态学习的全新机器学习模型，这一创新成果极大地提升了催化剂筛选的精准度与效率，为未来的催化剂设计提供了全新方法。多模态学习方法通过连接语言模型、图神经网络和其他高级机器学习模型，使得系统能够更高效地处理复杂化学体系中的数据，并从中筛选出最优的催化剂候选材料。

研究中，团队重点针对催化剂吸附配置的预测问题进行探索，提出一种基于语言模型的推理框架。该框架利用预训练语言模型的语义理解能力，将复杂的催化剂表面结构特征与吸附行为关联起来，从而实现催化剂筛选中的自动化

预测。此外，研究团队还引入图神经网络，以增强对催化剂分子结构和化学反应路径的解析能力。通过这一技术组合，该模型成功克服传统方法中的数据缺失、异质性高等难题，为催化剂筛选和设计带来全新突破。

与传统催化剂筛选方法相比，这一多模态学习模型具有明显优势。首先，它能够快速处理大规模数据集，显著缩短从数据收集到结果分析的时间；其次，该模型具备高度的拓展性，可以将不同类型的数据源（如实验数据、模拟结果和文献信息）进行无缝整合，进一步提高预测精度和全面性。研究团队还计划将更多物理化学信息纳入模型中，以实现更复杂催化剂设计问题的推理和规划。

这一研究为催化剂设计和开发提供强有力的工具，同时也展示人工智能在材料科学领域的巨大潜力。研究团队指出，多模态学习方法不仅适用于催化剂筛选，还可以推广到其他材料领域，如电池材料、储能材料等，为相关领域的创新研究提供全新思路。未来，随着这一模型的不断完善和功能扩展，它有望成为一种标准化工具，为绿色化学和能源技术的发展做出贡献。

资料来源：Ock, J., Badrinarayanan, S., Magar, R. et al. Multimodal language and graph learning of adsorption configuration in catalysis. *Nat Mach Intell* 6, 1501–1511 (2024).

迈科烯 (MXene) 表面结构的催化潜力

德国杜伊斯堡-埃森大学的研究团队在单原子催化剂研究领域取得重要突破，发现迈科烯 (MXene) 在电极电位条件下能够自发形成具有催化活性的表面刷

状结构。这一发现不仅为理解 MXene 的催化性能提供重要线索，还为低成本、无贵金属催化剂的开发开辟新方向。

迈科烯是一种新兴的二维材料，具有优异的导电性、热稳定性和表面修饰能力，在能源存储、传感器以及催化等领域表现出广泛应用潜力。传统观点认为，MXene 需要掺杂贵金属或其他活性材料才能展现出高效催化性能。然而，这项研究通过在阳极极化条件下进行原位实验，证实 MXene 表面会自发形成由单原子组成的活性催化中心，从而表现出显著的催化活性，尤其是在电催化反应中。

研究团队利用先进的计算方法和实验技术，包括原子分辨透射电子显微镜（TEM）、X 射线光电子能谱（XPS）以及密度泛函理论（DFT）计算，对这一过程进行深入探讨。他们发现，在电极电位条件下，MXene 表面的氧官能团与金属原子发生强相互作用，形成高度有序的单原子催化位点。这些位点不仅具有良好的稳定性，还表现出较高的催化选择性和活性。研究团队进一步指出，这一现象可以通过调控 MXene 的层间距、表面修饰和外加电位条件实现优化。

这一发现的意义在于，它提供一种全新的方法来开发高效、低成本的催化剂，尤其是在全球范围内致力于减少对贵金属依赖的背景下更显重要。单原子催化剂因其具有最大化原子利用率和优异的催化性能，近年来备受瞩目，但其制备和应用往往依赖昂贵且稀缺的金属元素。MXene 表面自发形成单原子催化中心的能力，为实现这一目标提供新的可能性，同时也为探索其他二维材料在催化领域的应用提供了新方向。

此外，这一研究还为深入理解催化剂的结构与性能关系提供重要的实验依据，有望在未来催化剂设计中被广泛应用。研究团队表示，他们将继续探索 MXene 在不同电催化反应（如氢气生产、二氧化碳还原反应）中的性能优化，同时研究其在工业级别制备中的可行性。这一系列工作不仅将为清洁能源技术发展提供新工具，还将推动迈科烯材料的商业化进程。

资料来源：Razzaq S, Faridi S, Kenmoe S, Usama M, Singh D, Meng L, Vines F, Illas F, Exner KS. MXenes Spontaneously Form Active and Selective Single-Atom Centers under Anodic Polarization Conditions. *J Am Chem Soc.* 2025 Jan 8;147(1):161-168. doi: 10.1021/jacs.4c08518. Epub 2024 Dec 16.

应用

美国通过催化剂寿命延长技术助力温室气体清洁转化

美国能源部橡树岭国家实验室的研究人员开发一种全新的策略，通过调控催化剂中金属活性位点与载体的相互作用，显著延长催化剂在甲烷干重整（DRM）反应中的使用寿命。这项技术突破为温室气体的高效清洁转化提供了新路径，也为开发更稳定、更持久的催化剂技术奠定基础。

甲烷干重整反应是一种将甲烷（ CH_4 ）与二氧化碳（ CO_2 ）转化为一氧化碳（ CO ）和氢气（ H_2 ）的反应，被视为同时减排两种温室气体并生产合成气的重要技术。然而，在高温条件下，该反应中的催化剂常因积碳和金属烧结而迅速失活，限制了其工业应用的可行性。为了应对这一挑战，研究团队设计了一种基于镍-沸石复合催化剂的创新策略，通过精确调控金属活性位点与载体的界面相互作用，大幅提高了催化剂的抗积碳和抗烧结能力。

实验结果显示，改良后的催化剂在长时间运行中保持稳定的催化性能，其耐用性相比传统催化剂提升了数倍。此外，研究人员通过原位表征和理论计算，揭示了界面调控如何影响催化剂的结构稳定性和反应机制。这一策略的核心在于优化金属颗粒与载体之间的相互作用，使催化剂在高温条件下形成稳定的活性结构，从而有效抑制副反应的发生。

这一研究不仅为甲烷干重整技术的推广应用提供了关键技术支持，还为其他高温催化反应中的催化剂设计提供了新思路。在能源转型和碳中和目标下，

这项技术具有重要意义，因为它能够将甲烷和二氧化碳等温室气体转化为清洁燃料和化学原料，同时减少对化石资源的依赖。

未来，研究团队计划将这一界面调控策略推广到其他催化体系中，例如甲烷部分氧化、费托合成等反应，以进一步提升催化剂的性能和稳定性。同时，他们还将探索工业级别的应用，评估该技术在大规模生产中的经济性和环境效益。

资料来源：Zhang, J., Li, Y., Song, H. et al. Tuning metal-support interactions in nickel-zeolite catalysts leads to enhanced stability during dry reforming of methane. Nat Commun 15, 8566 (2024).

德国通过自旋驱动晶体显着提高水分解效率

德国马克斯·普朗克固体化学物理研究所与魏茨曼科学研究所合作开发一种具有独特手性结构的新型催化剂，为清洁氢气生产带来突破性进展。研究团队通过将拓扑半金属材料与手性结构相结合，实现水分解氧析出反应（OER）效率的显著提升。实验结果表明，该催化剂的性能比传统材料高出 200 倍，为清洁能源技术提供了全新思路。

在清洁能源体系中，电解水制氢是最具潜力的技术之一。然而，氧析出反应由于其较高的动力学障碍，成为限制该技术发展的主要瓶颈。研究团队采用具有拓扑半金属特性的材料作为基础，通过精密设计材料的电子结构与表面手性，利用自旋极化电流驱动催化过程，从而降低氧析出反应的能垒，显著提高

反应速率。这种策略从根本上优化催化剂的电子迁移路径，并增强反应物与活性位点之间的协同作用。

研究人员通过一系列实验与理论分析，揭示这一创新背后的科学机制。他们利用原位电化学表征和密度泛函理论计算（DFT），证实自旋极化效应在电子转移和中间体稳定性中的关键作用。同时，手性结构不仅提升反应选择性，还有效抑制了副产物的生成，从而进一步提高反应效率。

这一研究不仅为解决传统催化剂在氧析出反应中的性能瓶颈提供解决方案，还为设计新型手性催化材料开辟新方向。拓扑半金属材料因其独特的量子特性和优异的导电性能，近年来在催化、电池和传感器等领域备受关注，而本研究的成功实践进一步证明这一类材料在电催化中的巨大潜力。

研究团队表示，这一催化剂设计方法在未来有望被推广应用于其他复杂电催化反应（如二氧化碳还原和氮气固定）。此外，他们计划探索其在实际电解水装置中的可行性，进一步推动清洁氢气的工业化生产。随着全球对碳中和目标的逐步推进，这一技术的广泛应用有望显著降低绿色氢气的生产成本，促进可再生能源的发展。

资料来源：Wang, X., Yang, Q., Singh, S. et al. Topological semimetals with intrinsic chirality as spin-controlling electrocatalysts for the oxygen evolution reaction. *Nat Energy* (2024).

韩国研发出快速评估氢燃料电池催化剂耐久性的创新技术

韩国首尔大学与现代汽车集团的研究团队联合开发一项突破性的电化学液体电池透射电子显微镜（e-LCTEM）技术。这一创新为快速评估氢燃料电池催

化剂的耐久性以及揭示其降解机制提供强有力的工具，为氢燃料电池的商业化进程注入新的动力。

氢燃料电池作为未来清洁能源的重要技术，其商业化进程一直受到催化剂耐久性与高昂测试成本的制约。传统耐久性测试方法需模拟汽车行驶数万公里的条件，耗时长且费用高昂。此次开发的 e-LCTEM 技术，通过将电化学分析与高分辨率透射电子显微镜相结合，显著缩短测试时间，仅需数小时便可完成对催化剂的耐久性评估，同时还能够动态观测催化剂降解过程中的微观结构演变。

研究团队在实验中利用 e-LCTEM 技术实时监测催化剂在工作状态下的降解过程，揭示催化剂性能衰退的关键因素，如纳米粒子的团聚、活性位点的失活以及载体材料的稳定性下降。这种方法不仅能准确捕捉催化剂在电化学环境中的动态变化，还能为优化催化剂设计提供实时反馈。

此外，研究人员还通过这一技术识别不同催化剂体系的降解路径，为开发更高性能的氢燃料电池催化剂提供宝贵的理论依据。例如，他们发现通过调整催化剂的金属组分和载体材料的微观结构，可显著提升其抗降解能力，从而延长燃料电池的使用寿命。这一发现为氢燃料电池技术的进一步优化奠定坚实基础。

这一创新技术的问世，不仅有助于大幅降低氢燃料电池的研发成本，还加速新型催化剂的开发与产业化进程。现代汽车集团表示，该技术在未来可能被广泛应用于燃料电池汽车的测试与优化中，从而进一步推动氢能技术的普及。

研究团队计划下一步探索 e-LCTEM 技术在其他电催化领域的应用潜力，例如二氧化碳还原反应（CO₂RR）和水分解制氢。他们相信，这一技术将为实现可持续能源转型提供重要支持。

资料来源：Kim S, Kwag J, Lee M, Kang S, Kim D, Oh JG, Heo YJ, Ryu J, Park J. Unraveling Serial Degradation Pathways of Supported Catalysts through Reliable Electrochemical Liquid-Cell TEM Analysis. *J Am Chem Soc.* 2025 Jan 8;147(1):181-191.

催化机理

德国科学家揭示镍基催化剂在电催化二氧化碳还原中的工作机制

德国马克斯·普朗克学会弗里茨·哈伯研究所的研究团队利用多项尖端技术，深入探讨镍基催化剂（Ni-NC）在电催化二氧化碳还原反应（CO₂RR）中的工作机制。这一研究不仅揭示催化剂活性中心的本质，还为开发更高效、更稳定的二氧化碳还原系统提供理论指导。

研究团队采用先进的原位硬 X 射线吸收光谱（XAS）和价核 X 射线发射光谱（vtc-XES）技术，结合机器学习算法与密度泛函理论计算（DFT），全面表征了镍基催化剂在反应过程中的结构演变和电子特性。他们发现，在电催化二氧化碳还原过程中，镍原子与氮化共碳（NC）载体形成高度稳定的活性位点，能够有效催化二氧化碳还原为一氧化碳。

通过对吸附中间体的结构与电子状态进行详细分析，研究人员进一步揭示镍原子在反应中承担的关键角色。实验结果表明，镍原子不仅能高效吸附二氧化碳分子，还能稳定地中和中间体的负电荷，从而降低反应活化能，提高催化效率。同时，研究指出，氮化共碳载体在电子转移过程中起到重要的协同作用，使得催化剂表现出优异的选择性和稳定性。

这一研究的创新之处在于将多种尖端技术与理论模型相结合，实现对催化剂工作机制的全方位解析。相比传统研究方法，这种综合性分析工具不仅提升研究效率，还为催化剂的结构优化提供更精准的方向。

研究团队表示，这一成果将为开发新一代二氧化碳还原技术提供重要参考，尤其是在全球致力于减少碳排放的大背景下更具现实意义。未来，他们计划进一步探索镍基催化剂在不同反应条件下的性能表现，并尝试引入其他过渡金属元素，以实现性能和成本之间的最佳平衡。

资料来源：Martini A, Timoshenko J, Grosse P, Rettenmaier C, Hursán D, Deplano G, Jeon HS, Bergmann A, Roldan Cuenya B. Adsorbate Configurations in Ni Single-Atom Catalysts during CO₂ Electrocatalytic Reduction Unveiled by Operando XAS, XES, and Machine Learning. *Phys Rev Lett.* 2024 Nov 29;133(22):228001.



地址：上海市永福路 265 号

邮编：200031

编辑：温一村

责编：崔晓文

编审：林鹤

电话：021-64455555

邮件：istis@libnet.sh.cn

网址：www.istis.sh.cn