

中国科学院大连化学物理研究所

优秀博士后支持计划申请表

申 请 人: 杜鹏飞

研 究 组: 1502 组

学科专业: 化学工程与技术

合作导师: 张涛院士

填表日期: 2025 年 7 月 22 日

中国科学院大连化学物理研究所制

姓 名		杜鹏飞		性 别		男	
				民 族		汉	
学历/学位		研究生/博士		授予博士学位时间		2025 年 3 月 25 日	
博士毕业院校		日本北海道大学		专 业		分子化学	
(拟)入站时间		2024 年 4 月 25 日		入站性质		<input type="checkbox"/> 统招统分	
学 习 经 历 从 本 科 起	起止年月		所在单位/专业			所获学位	
	2013. 9-2017. 6		武汉理工大学/材料科学与工程			学士	
	2017. 9-2021. 1		大连化物所/材料工程			硕士	
	2022. 4-2025. 3		北海道大学/分子化学			博士	
工 作 经 历	起止年月		所在单位			职务	
	2021. 3-2022. 3		大连化物所			实习	
博 士 学	博士论文题目		Development of high-performance catalysts for EtOH synthesis via CO ₂ hydrogenation and syngas conversion				

位
论
文
摘
要

(限 800 字)

Ethanol is used as a fuel additive and as a solvent or starting reagent in many chemical products. Due to the widespread demand for ethanol across various sectors, the global ethanol market is projected to grow rapidly at a rate of 5.6%. Currently, bioethanol is the primary source of ethanol used in industry and is a leading renewable biofuel, produced primarily from agricultural sources such as potatoes, lignocellulosic biomass, and corn starch. Although some progress has been made in coal-to-ethanol processes, the exploration of more efficient catalytic methods—such as syngas ($\text{CO}+\text{H}_2$) conversion and CO_2 hydrogenation remains crucial. Of particular interest is the hydrogenation of CO_2 to ethanol, which not only mitigates CO_2 emissions but also offers a renewable fuel and valuable chemical feedstock. This research aims to develop high-performance catalysts for ethanol synthesis through CO_2 hydrogenation and syngas conversion.

Chapter 1 outlines the scope and objectives of this work. Chapter 2 presents an efficient catalyst, K-Fe-Cu-Zn/ZrO_2 (KFeCuZn/ZrO_2), which enhances the EtOH space time yield (STY_{EtOH}) to $5.4 \text{ mmol g}_{\text{cat}}^{-1} \text{ h}^{-1}$, under optimized conditions (360°C , 4 MPa, and $12 \text{ L g}_{\text{cat}}^{-1} \text{ h}^{-1}$). *In situ/operando* spectroscopic techniques and various characterizations revealed the essential roles of K and Fe in EtOH synthesis. The introduction of Cu accelerated the formation of $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^*$, which is an important intermediate in EtOH production. Additionally, Zn inhibited EtOH decomposition, thereby improving the efficiency of EtOH synthesis.

Despite the promising performance of KFeCuZn/ZrO_2 , it falls short of industrial requirements, necessitating the development of more advanced catalysts. Chapter 3 shows a machine learning (ML) approach to accelerate catalyst discovery. Starting with an initial dataset of 58 catalysts (274 data points), 24 iterations (ML predictions and experimental validation) were conducted, resulting in the evaluation of 555 catalysts (2477 data points). This effort led to the discovery of a $\text{Pd(0.8)-Au(0.3)/K(2.5)-Sr(1)-Fe(20)-Zn(4)-Cd(2)-Yb(1)-Re(1)/CeO}_2(25\%)\text{-ZrO}_2$ catalyst with the highest STY_{EtOH} of $8.2 \text{ mmol g}_{\text{cat}}^{-1} \text{ h}^{-1}$. More than 70 highly active catalysts were identified through this data-driven approach, and detailed characterizations were performed to clarify the specific contributions of each component.

In Chapter 4, syngas conversion to ethanol was explored as an alternative synthesis pathway. A $\text{RhO}_x/\text{Li}_2\text{O/MgO}$ catalyst demonstrated excellent performance, achieving 20% ethanol selectivity and an STY_{EtOH} of $12.2 \text{ mmol g}_{\text{cat}}^{-1} \text{ h}^{-1}$ with a CO conversion rate of 35%. This catalyst outperformed other Rh-based catalytic systems. Characterizations and theoretical studies highlighted the significance of $\text{Li}_2\text{O-Rh}$ interactions on the MgO surface in modulating CO adsorption, which is critical for ethanol production. Chapter 5 is a general conclusion. This study extensively explored highly efficient catalysts for ethanol synthesis via CO_2 hydrogenation and syngas conversion. This not only advances the understanding of catalytic mechanisms but also provides a catalyst design guideline for the development of novel catalysts to produce value-added chemicals from low-cost and renewable feedstocks.

1、主持或参与项目情况：

序号	项目名称	项目来源	项目金额	起止年度	角色
----	------	------	------	------	----

入站前期及入站后科研情况简介						
	2、代表性论文（5篇以内）					
	注：“作者排序”中，如为通讯作者请填写“C”。					
	序号	论文题目	期刊名	影响因子	发表年度/卷期/页码	排序
	1	Domino Effect of Catalysis: Coherence between Reaction Network and Catalyst Restructuring Accelerating Surface Carburization for CO ₂ Hydrogenation	Journal of the American Chemical Society	15.6	2025, 147, 19622–19631	第一作者
	2	Single-atom-driven dynamic carburization over Pd ₁ -FeO _x catalyst boosting CO ₂ conversion.	Chem	19.6	2022, 8, 3252-3262	第一作者
	3	Ethanol synthesis via catalytic CO ₂ hydrogenation over multi-elemental KFeCuZn/ZrO ₂ catalyst	Chemical Science	7.4	2024, 15, 15925	第一作者
	4	CO _x - Resistant Oxidative Dehydrogenation of Cyclohexane Catalyzed by sp@sp Nanodiamonds towards Highly Selective Cyclohexene Production	ChemCatChem	3.9	2021, 13, 610 – 616	第一作者
	5	Direct Syngas-to-Ethanol Conversion over Lithium-Promoted Rh/MgO Catalysts	ACS Catalysis	13.1	2025, 15, 2033–2044	共同一作
	其他论文发表情况					
	6	A Review on Catalytic Ethanol Synthesis via Hydrogenation of Carbon Dioxide	ChemSusChem	6.6	2025, 18, e202500188	共同一作
	3、专利情况：					
	序号	专利名称	授权/申请	授权/申请号	起始日期	排序
	1	一种碳材料催化剂在环己烷氧化脱氢中的应用	授权	ZL 2019 1 1184988.0	2022 年 9 月 2 日	2
	2	一种高活性 Pd ₁ -Fe ₃ C ₂ 催化剂及其制备方法和应用	授权	ZL 2022 1 0204346.8	2023 年 09 月 26 日	2

3	一种合成高活性 PdFe@Fe ₃ C ₂ /Fe ₃ O ₄ 催化剂及其 制备方法和应用	申请	202410442299X	2024 年 4 月 12 日	2
4、获奖情况：					
序号	奖励名称	奖励等级	授奖单位	奖励年度	排序
1	北海道大学 EXEX 奖学金	校级	北海道大学	2023 年	1
2	北海道大学铃木章奖学金	校级	北海道大学	2022 年	1
3	武汉理工大学“三好学生”	校级	武汉理工大学	2015 年	1
博士后研究题目：机器学习辅助单原子催化剂优化：乙炔选择性加氢					

博士 后 工 作 的 研 究 计 划	<p>(简述研究计划的可行性、先进性和创新性，理论和现实意义)</p> <p>研究背景：</p> <p>发展高活性催化剂在各类催化反应中至关重要。目前，研究人员尝试通过定向合成、原位表征手段及理论计算等多种方法建立精准的构-效关系，以实现高效催化剂的理性设计，但这些方法并未达到预期效果，亟需寻找更高效的策略来筛选和开发高性能催化剂。</p> <p>近年来，人工智能（AI）与机器学习（ML）的发展为化学与材料科学领域带来了新的机遇，这些技术对加快新型催化材料的设计与发现具有巨大的潜力。在博士期间，申请人所在课题组提出了“多维元素描述符向量”的元素代理模型（<i>ChemCatChem</i>, 2019, 11, 4537; <i>ChemCatChem</i>, 2021, 13, 3636），用于探索具有潜在高性能且尚未报道的新元素。基于该模型，课题组在逆水煤气变换反应中成功开发出高活性真实催化剂（<i>Nat. Commun.</i>, 2023, 14, 2861），并展示了其在其他反应体系中的应用潜力。</p> <p>申请人拟在博士后期间，将该方法应用于发展高活性单原子催化剂，选取的目标反应为乙炔选择性加氢反应。根据反应特征，本人拟将预期目标设定为：乙烯选择性*乙炔产率，以期实现多目标优化。在得到高活性催化剂后，申请人拟结合先进的原位表征方法阐明其内在的构-效关系。</p> <p>可行性：</p> <p>申请人自博士入学以来，一直从事机器学习辅助高活性催化剂开发的相关工作，已成功获得 CO₂加氢制乙醇以及合成气转化制乙醇的高活性真实催化剂，所获得的催化剂均具备当前报道中最高的活性（时空收率），相关的成果已整理完成，准备投稿。此外，申请人在原位表征方面（TEM/XPS/IR）也取得了一系列重要成果（<i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2025, 147, 19622–19631; <i>Chem</i> 2022, 8, 3252–3266; <i>Chem. Sci.</i> 2024, 15, 15925; <i>ACS Catal.</i> 2025, 15, 2033–2044）。</p> <p>通过上述研究工作，申请人不但深入掌握了机器学习在催化研究中的应用，也系统掌握了多种原位表征技术，为本项目的顺利开展奠定了坚实的基础。同时，申请人博士后所在课题组在乙炔选择性加氢反应方面拥有丰富的研究经验与大量实验数据，为本项目的实施提供了有力保障。</p> <p>先进性与创新性：</p> <p>传统催化剂的开发是一个耗时且高度依赖经验的反复试错过程。数据科学与机器学习（ML）正逐渐成为催化研究的重要推动力，通过处理海量实验数据，构建预测催化性能的算法，并输出具有指导意义的信息，从而高效引导后续实验工作。</p> <p>目前，机器学习在催化领域的应用主要集中于加速理论计算过程以及拓展分子动力学模型。与此不同，申请人拟基于真实的催化活性数据，采用高准确性的“黑箱算法”，挖掘不同元素之间复杂且非线性的结构-性能关联规律。同时，结合博士课题组提出的“多维元素描述符向量”的元素代理模型，探索尚未被报道但具有潜在高活性的元素组合，推动催化剂设计从传统的“经验驱动”向“理性设计”转变。</p> <p>此外，本研究将采用“主动学习”的策略，在扩大数据库的同时动态修正预测模型，以不断提升其预测能力与准确性，为高效筛选催化剂提供更强有力的工具支持。</p> <p>理论与现实意义</p> <p>机器学习辅助的单原子催化剂开发不仅有望获得高活性的催化剂体系，还可为其他单原子催化剂的研究提供新的范式。同时，具备高乙炔选择加氢活性的催化剂有望显著提升工业乙烯提纯效率，降低生产成本，具有重要的工业价值。</p>
--	---

本人承诺	<p>本人承诺：申请表所填内容均真实可靠。对因虚报、伪造等行为引起的后果及法律责任均由本人承担。</p> <p>本人签字：杜鹏飞 2025 年 7 月 23 日</p>
------	---