



中国科学院特别研究助理资助项目 申 请 书

申请人姓名： 尚鑫

聘 用 单 位： 中国科学院大连化学物理研究所

(拟) 到岗工作时间： 2024 年 1 月

研 究 方 向： 二氧化碳转化和废塑料回收

所属一级学科： 化学工程与技术

填表日期： 2025 年 5 月 6 日

中国科学院人事局 2019 年制表

一、个人信息

(一) 基本信息					
姓 名	尚鑫		性 别	男	
婚姻状况			出生年月		
移动电话			国 籍	中国	
有效证件名称			证 件 号		
通讯地址	大连市沙河口区中山路 457 号		电子邮箱		
博士毕业院校/科研机构	中国科学院大学		获 博 士 学位时间	2024.01	
博士后信息 (新进站博士后填写)	博士后编号		合作导师	侯广进	
	进 站 时 间	2024.01	进站一级学科	化学	
(二) 主要学习/工作经历					
注：学习经历从本科阶段填起；工作经历包括在国内外机构访问、进修等。					
学习经历	起止时间	院校/科研机构	国别	专业	学历
	2012.09-2014.07	南开大学	中国	化学	学士
	2014.07-2016.07	天津大学	中国	化学工程	学士
	2016.09-2019.07	天津大学	中国	化学工艺	硕士
	2019.09-2024.01	中国科学院大连化学物理研究所	中国	工业催化	博士
工作经历	起止时间	院校/科研机构	国别	研究方向	工作岗位
	2024.01-至今	中国科学院大连化学物理研究所	中国	二氧化碳转化和废塑料回收	博士后

如内容较多，本栏目填不下时，可另附纸接续（以下各栏目均如此）。

(三) 学术及科研情况						
1. 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”。						
题目	刊物/会议名称	发表时间	作者	卷期、	影响因子	引用
Xylene Synthesis Through Tandem CO ₂ Hydrogenation and Toluene Methylation Over a Composite ZnZrO Zeolite Catalyst	Angewandte Chemie International Edition	2023.07	1	62, 37, e2023 0937 7	16.1	20
Boosting C-O Bond Cleavage and Reverse Water-Gas Shift Activity via Enriched In-Plane Sulfur Vacancies in Single-Layer Molybdenum Disulfide	Angewandte Chemie International Edition	2025.01	C	64, 17, e2024 2295 3	16.1	0
Preferential Synthesis of Toluene and Xylene from CO ₂ Hydrogenation in the Presence of Benzene through an Enhanced Coupling Reaction	ACS Catalysis	2022.11	1	12, 21, 1374 1-137 54	11.3	24
Regulating anisotropic diffusion in zeolite for reinforced para-xylene synthesis via CO ₂ hydrogenation in the presence of toluene	Applied Catalysis B: Environment and Energy	2024.12	1	359, 1245 23	22.1	0

Methoxy-bridged tandem CO ₂ hydrogenation and ethylbenzene alkylation for selective synthesis of para-ethyl-toluene	Applied Catalysis B: Environment and Energy	2024.07	1	348, 1238 33	22.1	0
2. 主持（参与）的国家或省部级项目/课题（5项以内） 注：①“起止时间”精确到月；②“项目/课题属类”请填写该项目的归属，如国家自然科学基金、国家重大科技专项、国家重点研发计划等；③“承担角色”请填写主持、参与等。						
项目/课题名称	起止时间	项目/课题属类	下达部门	项目经费	承担角色	
高效催化甲苯共进料下 CO _x 加氢联产低碳烯烃、对二甲苯复合催化剂的可控构筑	2025.01-2027.12	国家自然科学基金	国家自然科学基金委员会	30 万元	主持	
基于组分协同效应调控构筑 金属沸石多功能催化剂用于 CO _x 和聚烯烃共转化制芳烃的研究	2024.01-2026.01	博士后科学基金	中国博士后科学基金会	8 万元	主持	
多级孔沸石中构筑金属氧化物位点锚定单原子催化剂用于聚烯烃氢解的反应研究	2024.01-2026.01	博士后科学基金	中国博士后科学基金会	24 万元	主持	
3. 出版专著情况（3项以内）						
专著名称	出版时间	出版社			作者排序	

4. 申请和已取得专利情况（5 项以内）

专利名称	类型	授权时间	批准国家	授权编号	申请人排序
一种采用集成催化剂耦合催化草酸酯加氢制乙醇的方法	发明专利	2022.05	中国	CN201910358089.1	2
一种二氧化碳加氢耦合苯烷基化制甲苯和二甲苯的方法	发明专利	2022.11（申请）	中国	202211445468.2	2
一种合成气转化耦合乙苯制备甲乙苯的方法	发明专利	2023.11（申请）	中国	202311604828.3	2
一种二氧化碳加氢耦合乙苯制备甲乙苯的方法	发明专利	2023.11（申请）	中国	202311615687.5	2
一种二氧化碳加氢耦合甲苯烷基化制对二甲苯的方法	发明专利	2022.11（申请）	中国	202211445481.8	2

5. 奖励情况（5 项以内）

奖励名称	获奖时间	授予单位	获奖人排名

（四）其他

注：填写在国际学术组织兼职、在国际学术会议做重要报告等情况。

二、拟开展的研究工作

(一) 研究工作基本情况

研究方向	CO _x 小分子与聚烯烃共转化金属沸石复合催化剂的构筑和研究
------	---

(二) 研究基础

注：填写目前已从事或具备的基础工作，不超过 1000 字。

申请人攻读博士学位所在团队与博士后合作导师团队在 CO_x 加氢体系，金属、沸石催化剂可控构筑和构效关系研究方面有着长期积累，在利用固体核磁、红外等原位表征技术研究多相催化体系中 CO_x、H₂ 等小分子活化、沸石内酸催化烃类转化反应等方面也有着丰富的科研经验。

申请人前期在金属氧化物沸石复合催化剂催化 CO₂ 加氢制芳烃体系材料制备、构效关系等方面开展了系统和深入的研究工作，以(共同)第一，通讯作者身份在 *Angew. Chem. Int. Ed.*, *ACS Catal.*, *Appl. Catal. B*, *Chem. Sci.* 等学术期刊上发表相关论文 10 余篇。

申请人前期工作中通过在 ZnZrO_x 与 ZSM-5 复合催化剂的沸石组分中浸渍引入杂原子 Zn 物种，在苯共进料下的 CO₂ 加氢制取甲苯反应中显著提高目标产物甲苯选择性，并同步提高 CO₂ 转化效率 (*ACS Catal.*, 2022, 12, 13741-13754)。多种探针分子实验技术阐明金属杂原子 Zn 引入有效改善沸石酸性质，中等强度 L 酸促进目标产物脱附，有利于活性位点更新，抑制二次反应，增强串联反应耦合过程。

申请人通过以金属 Zn 和 Zr 的柠檬酸盐为前体一锅溶胶凝胶法制备得到的 ZnZrO/ZSM-5 复合催化剂，该催化剂可在甲苯共进料下的 CO₂ 加氢表现出加氢性能和二甲苯选择性的双重提升 (*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, 62, e202309377)。应用多种探针分子吸附实验、原位固体核磁、红外表征技术，结合理论计算手段阐明紧密接触增加了金

属分散度和表面空位，强化了 CO_2 吸附和活性 H 的形成，同时改善了沸石酸性，增强了组分间协同效应。

申请人通过构筑特定取向晶体堆叠形貌的 MFI 型沸石控制多烷基取代苯异构体的扩散性质，在 CO_2 加氢和甲苯共进料条件下获得超过 90% 的二甲苯和对位二甲苯选择性 (*Appl. Catal., B* 2024, 359, 124523)，在 CO_2 加氢和乙苯共进料下获得超过 70% 选择性的对位甲基乙苯产物 (*Appl. Catal. B*, 2024, 348, 123833)。申请人借助原位固体核磁技术、同位素标记探针分子实验、原位红外技术，结合理论计算，揭示了改性沸石中择形反应效率得到有效提高的关键控制因素。

申请人针对钼基 CO_2 加氢催化材料展开研究，提出软硬双模板制备策略实现二维硫化钼可控构筑，并揭示了受材料分层结构控制的特征缺陷位分布及其主导的 CO_2 中 C-O 键解离过程 (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, e202422953)。针对沸石中金属位点的引入，以乙二胺配体控制 Pt 与 Sn 在 MFI 沸石中均匀分散，揭示了过量 Sn-L 酸位点可促进烯烃中间体吸附深度芳构 (*Catal. Sci. Technol.* 2025)。针对聚烯烃模型分子转化，开发多种过渡金属硫化物与酸性沸石复合催化体系，实现无贵金属温和条件下高效制取液相产品，副产物甲烷控制到 0.1% 以下。

(三) 主要目标

注：填写开展研究工作拟解决的科学问题或对所属学科领域产生的推动作用，不超过 500 字。

本研究以聚烯烃高效转化为液相产物为目标，提出以 CO_x 对活性 H 原位转化调节产物碳氢比的策略，突破现有研究中生成饱和烃的过度氢解和氢转移副反应严重，导致芳烃收率低，过程经济性差的瓶颈问题。研究围绕金属沸石多功能催化剂中组分间协同效应的调控开展，对目前聚烯烃催化利用体系中较少涉及的 C-H、C-C 和 C-O 共转化机制进行深入分析，具体目标如下：

1) 本研究基于 CO_x 活化、活性 H 转移和芳烃生成的需求，灵活构筑具有可控的组分间相互作用、空间分布和物理化学结构的金属沸石多功能催化剂，实现多尺度和多环节的功能互补和协同效应，突破聚烯烃转化制芳烃中的产物收率限制；

2) 本研究通过 ssNMR、STEM、XAS、XPS、IR 等材料表征技术，对金属中心结构、沸石酸性和孔道结构相关的结构活性关联进行探究，获得 C-H、C-C 和 C-O 等多种化学键活化转化受催化剂组分协同效应影响的规律，为针对性的多功能催化剂设计提供目前所缺少的经验指导；

3) 本研究通过同位素标记的原位 ssNMR 和 IR 技术，结合模型化合物探针实验和理论计算方法，对聚烯烃和 CO_x 共转化制芳烃过程中的关键中间物种和动力学步骤从分子

尺度进行剖析，为催化剂的设计和优化以及新型反应路线的开发和调控提供当前急需的理论基础。

(四) 研究计划

注：不超过 1000 字。

1. 金属基 CO_x 加氢催化材料的选控构筑

基于本团队前期工作认识，以两类制备方法为核心研究方案，包括：溶胶凝胶法，采用金属盐与溶剂、交联剂在一定 pH 下生成溶胶，脱水形成凝胶，焙烧获得材料；共沉淀法，以一定浓度的碱性溶液调节金属盐溶液 pH 到完全沉淀，干燥焙烧得到材料。以动态气氛或固相反应等方式构筑碳化物、硫化物界面。

反应评价以 CO_x 加氢和长链烷烃高温转化为探针反应，通过高压固定床反应器进行，色谱在线分析产物；在动力学区间采集反应级数、表观活化能等参数；探索与操作条件如温度、压力等相关的性能变化趋势。

通过 XRD、XPS、ssNMR、XAS、IR、TEM 等技术，辨识金属中心结构，捕捉关键中间体信息，结合 DFT 计算，揭示分子尺度的反应机理。

2. 沸石组分酸性质和孔道扩散性质及碳碳键形成断裂机制的研究

基于本团队前期工作认识，借助有机配体稳定作用，将一系列主族、过渡、稀土金属等直接引入沸石水热合成体系中，固载在沸石特定空间中，得到金属杂原子改性沸石。沸石形貌调节通过控制助剂（如尿素、淀粉）添加量、投料比例、酸碱性、温度、时长等参数实现，以调控沸石在各晶面取向上尺度、特征孔道分布。

通过 XRD, TEM, ^{27}Al ^{29}Si ssNMR 等表征确定沸石骨架结构，获得金属配位等信息。以探针分子吸附结合原位 IR，程序升温 (TP)， ^1H ^{31}P ^{27}Al ssNMR 等表征研究沸石内外 B 酸 L 酸特征信息。通过探针分子吸附扩散实验，借助 ZLC（零长柱），IGA（智能重量分析），IR 等技术对扩散系数定量测量。结合分子动力学模拟，对扩散动力学进行分析。

以链烷烃芳构化、单环芳烃烷基化为探针反应,通过原位 IR, ^1H ^{13}C 多核相关 ssNMR, 气相色谱-质谱联用 (GC-MS) 等技术,揭示沸石内碳碳键形成断裂机制,阐明目标产物生成与金属中心、酸性位点、扩散性质等的构效关系。

3. 金属基材料与沸石组装方法调控及多位点协同催化机制研究

采取包括化学结合(如沉淀、浸渍、包覆)、物理混合(如研磨、颗粒混合)等不同方式将上述获得的改性沸石与金属基组分进行组合。使用间歇釜式反应器、固定床反应器进行评价,色谱在线检测分析流出产物。调变反应温度、压力、原料比例、进料速率、停留时间等要素,探明复合催化剂最佳工作条件。结合原位 TEM、XPS 等技术,剖析反应条件下活性位点、界面结构等性质的变化规律;结合原位 ssNMR、漫反射 IR、同位素标记实验,反应瞬时液氮冷冻固相萃取方法,捕捉关键中间体信息,揭示分子尺度的反应机理,阐明 CO_x 转化与烯烃芳烃生成活性、选择性和多位点协同作用之间的内在关联。

三、申请人承诺

本人郑重承诺:

以上信息均真实、准确;本人自愿承担因上述信息不实造成的一切后果。
入选后,本人将严格遵守相关管理规定。

申请人签字: 尚鑫

2025 年 5 月 7 日