



催化与表界面化学“十五五”发展战略规划概述

高飞雪*, 何鹏

国家自然科学基金委员会化学科学部, 北京 100085

*通讯作者, E-mail: gaofx@nsfc.gov.cn

收稿日期: 2026-02-11; 接受日期: 2026-02-27; 网络版发表日期: 2026-03-17

摘要 在国家自然科学基金委员会“十五五”发展规划框架下, 立足世界科学前沿和国家重大战略需求及学科长远发展目标, 本文系统阐述了催化与表界面化学的科学内涵、战略价值与发展规律, 深入分析了我国在该领域的研究基础和面临的主要挑战, 梳理了未来五年亟需突破的关键方向与优先发展领域, 并在此基础上就保障学科健康发展的相关措施与政策提出了若干建议与思考, 旨在为“十五五”期间我国催化与表界面化学的整体布局 and 高质量发展提供战略参考.

关键词 催化与表界面化学, 学科“十五五”发展战略规划, 学科发展布局, 优先资助领域

1 引言

凡尺寸有限的含有凝聚相的物质体系皆存在界面. 界面两侧的化学成分、凝聚相结构或周期性存在着显著差异, 因而其物理和化学性质表现出明显的变化. 一侧为气相或真空的界面被称为表面. 凝聚相可以形成多相以及多种相界面(如气-液、液-液、固-液界面等), 其物理化学行为涉及界面结构、界面分子相互作用、界面传质与反应过程. 表界面化学就是研究表面或界面处的化学转化与过程. 表面体系的化学研究就是表面化学. 若反应分子不断在催化剂上吸附、活化与反应, 反应进程不断加快, 产物不断离开, 如此循环进行的化学过程, 即为催化. 依据能量输入形式的不同, 催化又可分为热催化、电催化和光催化等. 若涉及多相分散体系的吸附、润湿、自组装等界面行为, 则属于胶体与界面化学的重点范畴. 若在电极/电解质

界面发生涉及电荷转移和物质转化的动力学过程则称为电化学体系. 催化与表界面化学作为物质科学中的重要组成部分, 致力于揭示界面处的物质转化与性能调控的内在规律, 在能源和资源利用、高端制造、信息器件与生命健康等国家重大战略领域中发挥着无可替代的支撑作用.

“十五五”时期是我国由科技大国迈向科技强国、由要素驱动向创新驱动的深度转型的关键阶段, 将进一步凸显基础研究在国家创新体系中的战略地位. 我国催化与表界面化学正处于从“跟跑”、“并跑”到“领跑”的重要战略窗口期. 为此, 系统梳理催化与表界面化学学科的发展规律和面临的重大挑战, 科学谋划学科在“十五五”期间的战略布局, 确定重点发展和优先支持领域等, 对于提升我国催化与表界面化学的原始创新能力和国际引领地位具有重要的科学价值和战略意义.

引用格式: Gao F, He P. Strategic development of catalysis and surface/interface chemistry of the National Natural Science Foundation of China for the 15th Five-Year Plan. *Sci Sin Chim*, 2026, 56: 1355–1365, doi: [10.1360/SSC-2026-0040](https://doi.org/10.1360/SSC-2026-0040)

2 本学科的科学意义与战略价值

化学是物质科学的重要组成部分, 而催化与表界面化学则是化学的核心学科, 是衔接基础与应用研究的桥梁, 研究物质在不同相界面的转化过程及其调控规律. 催化与表界面化学主要涵盖催化化学、电化学、表面化学、胶体与界面化学等.

催化化学致力于在分子与表界面层次揭示化学转化规律, 实现反应的高效、低耗与高选择性调控, 是物质转化的核心, 是碳循环、清洁能源、绿色化工及生命健康等前沿领域的重要基础. 催化剂的精准设计、先进表征及对催化理论与机制的认知, 是催化化学发展的关键科学支撑. 通过催化可实现化石能源清洁利用、二氧化碳转化、生物质与废塑料循环升级, 支撑低碳经济体系的构建, 服务国家“双碳”目标. 光/电催化技术可将太阳能与电能直接转化为燃料与高值化学品, 为可再生能源与人工光合成奠定基础; 氢能技术也依赖于催化化学的持续突破.

电化学研究电能与化学能的相互转换, 聚焦界面电荷转移与物质转化过程, 探究其热力学与动力学机制, 为能量转换、物质合成、信息传感及微纳制造等领域提供理论基础与技术创新路径. 电化学为国家能源结构调整、半导体产业自主创新、生物医学传感与高端化学品制造提供了科学支撑. 电化学能量转换(动力电池、储能系统、氢能技术)服务于新能源汽车与可再生能源利用; 电化学物质转化(电合成、碳基分子催化转化)支撑氯碱和电解铝等基础性产业, 为工业制造提供绿色途径; 电化学信息转换则利用界面处电子/离子的传输来实现生命体系化学信息的传感与调控, 应用于神经疾病治疗和脑机接口等尖端科技领域.

表面化学在原子和分子尺度研究表界面结构、性质与过程, 聚焦于表界面的精准构筑和性质调控, 探究吸附、扩散和反应等界面行为及电荷转移与能量传递机制, 揭示表界面结构、电子态与宏观性能之间的定量关系. 超高分辨与多模态表征技术推动了表面化学的快速发展. 表面化学基础性和交叉性强, 是连接多学科的重要桥梁, 不仅为凝聚态物理、材料与生命科学奠定理论基础, 也为能源催化、电子器件、量子科技、核技术等前沿领域提供基础支撑.

胶体与界面化学研究微观非均相体系与界面现

象, 关联微观行为与宏观性能, 揭示物质在微介观尺度的分散与聚集稳定性、自组装及界面效应、表界面润湿与毛细现象等普适规律, 推动微介观尺度关键技术突破. 胶体与界面化学的发展与国家战略需求相适应, 加速向智能材料、生物医药与绿色化工等关键领域渗透, 为健康、农业、能源、材料及制造等国家重大战略需求和国计民生行业提供关键科学支撑.

催化与表界面化学高度依赖基础理论的创新发展与表征技术的持续进步, 其关键挑战是复杂环境下表界面动态过程的微观机制与构效关系. 在基础理论方面, 多尺度量子统计理论与计算模拟有助于揭示表界面物质与能量转化规律. 高性能计算与人工智能加速形成智能建模新范式, 成为建立理论驱动理性预测和性能设计的科学前沿. 在表征技术方面, 原位、动态与跨尺度表征方法的发展, 界面结构动态演变及全反应过程的追踪至关重要, 多模态与超快动态可视化技术为本学科的发展提供重要的技术支撑. 理论与实验相结合方面, 通过人工智能辅助, 构建“表征—解析—预测—调控”闭环, 实现从原子到介观尺度的动态解析, 结合传质、传热及外场效应建立定量构效关系.

3 本学科的发展规律、研究特点及范畴

催化与表界面化学基于“结构—性能—机制”的内在逻辑和科学规律而发展, 随着科学工具、理论方法和人工智能的不断进步, 正经历着前沿领域的变化与科学研究范式的变革. 其发展呈现出典型的“四化”特征, 即体系微观化、过程动态化、领域交叉化和方法智能化. 总之, 研究体系从理想模型向复杂真实体系、从理想条件与环境向复杂工况条件深入发展; 表征方法由静态稳态向原位动态、由单一模态检测向多模态分析拓展; 研究范式从“结构—性能”经验总结到“机理—预测”定量描述, 形成“工况表征—数据解析—模型预测—过程调控”的智能研究模式.

催化与表界面化学的发展既受到国家重大战略需求的牵引, 又得益于表征技术的持续创新和突破, 并与理论计算、人工智能、大数据等深度融合, 形成了多学科交叉的创新研究范式. 在科学研究中, 将宏观性质调控与微观机制认知有机统一: 既着眼于新体系的创制和新功能的实现, 又致力于原子和分子水平的超

高时空分辨表征和机理探究。

催化与表界面化学的研究范畴包括从原子/分子尺度到宏观体系的表界面现象观测及其调控规律认识,进而揭示物质在诸多相界面的相互作用与转化机制,并构筑高效功能表界面体系。它既要跨越微观、介观和宏观的空间尺度,又要跨越阿秒、飞秒到以年为单位的时间尺度,其研究正不断向多尺度和多层次拓展与深化。

催化化学的研究包括从活性中心结构的设计和精准构筑、反应中间体转化到反应器集成的跨尺度研究,实现对活性、选择性和稳定性的精准调控。催化剂的创制与开发已从早期凭经验、靠试错的大量筛选,逐步演化为基于理论模拟和理性设计的精准合成。面向能源转型的重大需求,耦合可再生资源的化石资源催化转化正成为重要发展趋势。同时,热催化、光催化与电催化之间的协同融合,及其与合成生物学等学科的交叉,形成了跨学科发展的态势,为催化学科的持续发展提供新的机遇与动力。

电化学研究始终围绕“电极/电解质”界面展开,各种新型固态(聚合物)电解质的出现不仅丰富了电化学的内涵,也推动了电化学技术的更新换代。借助各种先进谱学方法深入揭示电化学界面的微观机制和动力学特性是当代电化学研究的特征,目标是建立“材料结构—反应机制—器件性能”的科学关联,最终获得高效的能量与物质转化新体系。

表面化学沿着“阐释—还原—创新”的发展路径快速发展,从经典的唯象模型解释宏观现象,过渡到借助高分辨技术揭示原子/分子尺度的机理,进而融合机器学习等手段推动材料设计与智能制造。其研究涵盖了表界面理论、反应机制、先进表征技术及在信息、催化、量子材料等领域的交叉应用。近年来,学科呈现出三大发展趋势: (1) 测量精度与多维表征持续提升,实现了从单原子、单分子到单自旋的精准探测; (2) 从静态观测迈向跨尺度动态追踪,发展出原位实时探测技术,覆盖了从秒到飞秒的动力学过程; (3) 从理想模型拓展至复杂实际环境,探索极端工况下表界面响应与失效机制,构建适用于量子与电子器件以及生命体系等复杂场景的高分辨测量体系。

胶体与界面化学研究物质的多相分散体系及界面行为,重点关注胶体稳定性与相行为、非平衡体系与

智能响应以及界面吸附、浸润与自组装等过程的热力学与动力学,旨在动态、跨尺度揭示微观分子间作用机制、结构与宏观性质之间的内在关联。多尺度与非平衡态基础理论的发展,不断深化人们对胶体与界面体系的认知。随着先进软物质表征技术的进步,对胶体与界面体系从静态到动态、从平衡到非平衡的多尺度解析成为可能。

催化与表界面化学的基础理论发展呈现出由微观到宏观、由经验到模型、由定性解释到定量预测的发展趋势,整体经历了从“定性理解”到“定量预测”、从“静态结构”到“动态过程”、从“理想表面”到“真实工况”模拟的持续演进;在微观层次上,以量子力学为基础揭示微观电子结构、化学成键与反应机理,并通过统计力学与非平衡态理论建立原子尺度行为与宏观热力学、动力学规律之间的桥梁;研究对象从早期理想晶面拓展至限域空间、单原子/团簇/纳米催化剂、电解质与溶剂环境及胶体等复杂体系,涵盖原子到反应器尺度的多层次结构,并涉及光、电、磁、热、力、等离子体等多物理场耦合的非平衡过程;随着原位工况表征、高通量计算与多模态数据的快速积累,人工智能与大数据驱动的理论建模正成为重要研究范式,推动建立可预测的表界面反应模型、提出新的反应描述与“结构—性能”关系概念,为表界面化学提供系统化的理论基础。

4 本学科的发展现状与存在问题

我国催化与表界面化学研究近年来取得显著进步。在催化领域,单原子催化、纳米限域催化和光催化等方向已形成了重要的国际影响力,在合成气转化、二氧化碳还原和废塑料资源化等关键科学与核心技术方面取得多项原创成果。电化学则依托国家新能源战略,在固态电池和芯片制造电子电镀等攻坚和“卡脖子”方向,建立了“理论—表征—人工智能”的创新研究范式。表面化学在化学键分辨的qPlus原子力显微镜和飞秒激光扫描隧道显微镜等尖端表征技术方面取得重要突破。胶体与界面化学在生物分子定向组装和相分离动力学等前沿方向呈现良好发展态势。

在快速发展的同时,本学科仍面临若干共性问题:从静态模型向动态、真实工况的研究范式转变尚未完

成, 对复杂反应体系中的“结构—性能—机制”关系的定量化描述仍显不足; 人工智能与理论模型、实验表征的深度融合有待加强, 跨尺度、多物理场协同研究体系尚不成熟; 高质量、标准化数据库的建设以及原创性仪器的创制能力不足, 制约了数据驱动的智能设计与科学发现; 同时, 基础研究与应用转化衔接通道不畅, 原创性理论与颠覆性技术突破有限, 跨学科协同与系统性创新生态仍待进一步完善。具体来说, 各学科发展面临的主要挑战简述如下。

4.1 催化化学

催化化学的核心挑战是催化剂的理性设计与精准构筑。尽管通过可控合成与原位表征建立活性位结构与催化性能之间的关系一直是催化领域的主要研究方向, 但在大多催化体系中, “结构—性能—机制”之间尚未建立准确、定量的构效关系。对于复杂的多相催化体系, 活性位的精准定位与定量描述仍是关键瓶颈。尤其在工况反应条件下, 对催化活性位本征结构的动态表征仍面临诸多困难, 从而制约了人们对催化过程本质的深入理解。原创性催化概念与颠覆性反应路线是催化创新发展的原动力, 但我国在这方面的突破依然有限。催化基础研究成果转化薄弱, 导致许多关键化工过程所依赖的核心催化剂自主化不足, 相关核心技术长期受到外部制约。

4.2 电化学

电化学的发展存在一定程度的表面繁荣现象, 大多数研究只是将电化学作为一种应用工具, 对电化学自身科学体系的发展贡献不大。在基础电化学层面, 突出的问题包括: 缺乏针对内球反应的电子转移理论, 完整的电催化反应动力学体系尚未建立; 偏重电极材料研究, 对电解质化学环境调控规律的认识尚待深化; 基础研究与实际应用脱节, 基于溶液的基础电化学研究成果往往无法直接应用于实际器件。

4.3 表面化学

研究主要集中于真空表面合成和模型催化两个方向, 在低维分子量子材料合成领域进展显著, 但在量子性质检测与调控、器件应用方面进展缓慢。模型催化研究仍以规整体系为主, 完全克服压力鸿沟和材料鸿沟尚待努力。核心表征仪器高度依赖进口, 跨学科协

同与原创仪器研制能力不足。

4.4 胶体与界面化学

在基础研究方面, 对跨尺度的分子聚集、胶体体系缺乏有效的理论计算模拟方法, 对分散体系的非平衡态、动态过程、界面聚集及相互作用机理的理性认识滞后, 软物质体系与玻璃态结构的表征技术匮乏。在应用基础研究方面, 宏量制备中的稳定性和批次重现性有待提升, 实验室成果向产业转化脱节。

4.5 基础理论

对复杂表界面体系而言, 现有基础理论在高精度描述微观电子结构与反应机理方面仍显不足, 缺乏可在真实工况条件下可靠适用的新一代理论方法; 人工智能辅助的跨尺度模拟理论框架尚不成熟, 难以有效联通量子层次电子行为与介观乃至宏观的热力学、动力学过程, 多物理场耦合与复杂反应网络仍主要停留在局部或经验化建模层面; 同时, 理论研究多聚焦于具体体系与参数拟合, 尚未系统上升为具有普适性的模型、判据与概念框架, 制约了对反应活性、选择性与稳定性协同调控规律的本质认识及学科整体的理论引领能力。

4.6 表征技术

缺乏完整的“工况表征—数据解析—模型预测—过程调控”全链条智能化研究体系, 不同模态数据的关联分析存在着技术瓶颈。基于新物理原理的表界面表征技术和原创性仪器研制能力薄弱, 制约了对复杂界面(如气-固、液-固、软物质、非晶态/非周期性界面以及深埋于材料内部或被反应环境覆盖的真实界面等)的结构与性质的突破性认知。现有技术难以同时满足原子级空间分辨、高化学灵敏度和超快时间分辨要求。在表面量子态与量子相干等性质的直接探测方面存在明显不足。在智能化表征方面, 多模态谱学数据的实时动态解析能力薄弱, 高质量标准数据库建设滞后, 定制化表征方案设计的智能化程度不高。

5 未来5年发展布局与优先领域

在系统论述了学科所面临的重大挑战、发展机遇与战略思考基础上, 未来5年, 催化与表界面化学将围

绕国家重大战略需求和学科发展前沿研究, 重点布局以下发展方向和优先领域。

5.1 面向世界科技前沿

5.1.1 人工智能辅助的理论、计算模拟与数据平台

针对复杂表界面体系在真实工况条件下机理难以精准描述与预测的瓶颈, 系统布局和建设实验和计算的表界面数据库, 建立以人工智能辅助的理论建模与跨尺度模拟体系, 将机器学习深度嵌入电子结构计算、势能面构建与动力学建模全过程, 实现微观电子行为、统计力学描述与宏观反应动力学之间的有效联通; 面向多物理场耦合与复杂反应网络, 重点发展人工智能驱动的自动反应路径探索、三维构型与相空间高效搜索方法, 形成可迁移、可预测的势能与动力学模型; 同步建设面向表界面体系的开放式数据平台, 统一数据标准与元数据规范, 集成高精度计算、跨尺度模拟与原位工况实验数据, 支撑模型训练、验证与持续演化; 在此基础上, 凝练可引领实验的新理论预测模型与反应新概念, 构建“预测—验证—反馈”一体化研究范式, 为绿色能源、氢能与绿色碳科学等国家重大战略领域中复杂表界面体系的理性设计提供系统的理论与方法支撑。

5.1.2 超高时空分辨的动态与工况表征技术

围绕催化与表界面科学体系的真实环境与极限分辨需求, 突破传统静态研究局限, 构建适用于真实工况的理论与表征体系, 实现从原子到宏观尺度的全时空动态监测, 精准追踪反应中间态与活性中心演化过程。研究重点涵盖真实环境下的原位多模态表征技术开发、大科学装置支撑的精准观测、胶体界面亚稳态演化机制解析以及数据驱动的跨尺度智能建模。随着测量分辨率逐渐逼近物理极限, 亟需突破传统理论框架, 发展基于量子效应的新型探测机制, 并构筑人工智能赋能的跨尺度动态解析体系。

具体而言, 开展基于新奇物态与量子效应的原理探索, 建立多参量、多维度一体化测量的内在联系, 形成对表界面全局构效关系的系统性认识; 发展以金刚石色心、电子自旋共振、量子干涉等为代表的量子精密测量技术, 实现对弱磁、相干传能、自旋态及非晶材料的高灵敏探测; 研制并发展适用于复杂器件、化学反应及生命环境的原位高分辨仪器和方法, 融合

人工智能实现跨尺度动态过程解析, 并自主开发核心探测器与软硬件系统, 构建高端探测装备的完整技术链, 形成良好的技术链应用生态。在此基础上, 通过建立“表征—解析—预测—调控”的研究闭环模式, 形成数字孪生模型, 为高端仪器研制、原子制造与量子信息等战略领域提供关键科学与技术支撑。表界面精准探测是实现能源、催化及材料等领域构效关系的定量刻画与功能体系的理性设计的关键基础。

5.1.3 催化剂设计与活性中心精准构筑

面向“精准催化”的需求, 催化剂的创制正逐步由试错式的大量筛选演化为基于机理认识、理论模拟和可控合成的理性设计, 致力于构建单原子、单原子合金、亚纳米单团簇等活性位结构明确且微环境可控的催化体系, 并进一步发展催化剂设计与表面反应过程调控新方法, 建立清晰可靠的“结构—性能”关系, 推动催化科学向可预测、可设计的方向发展。充分运用先进原位动态表征、大数据科学、人工智能的创新成果, 发展高性能催化剂智能设计和精准制备方法, 大幅缩短高效催化剂的研发周期。建立功能导向的多级结构跨尺度精准构筑新范式, 发展兼具原子级精度与宏量制备能力的绿色合成技术, 提升我国关键工业过程催化剂的自主研发能力和话语权。

5.1.4 碳基量子磁体与量子态调控

碳基量子磁体作为一种新型有机量子材料, 因其高度离域的 π 电子结构、弱自旋-轨道耦合以及外场可调的量子自旋态, 为研究拓扑序、量子纠缠与量子比特等前沿方向提供了理想平台。该方向突破了传统金属基磁体的局限, 推动轻质碳基材料的可控设计与多学科交叉融合, 助力从基础研究到实际应用的全链条创新。该领域聚焦五大研究方向: (1) 实现碳自由基骨架的原子级精准合成与自旋相干性的外场调控; (2) 揭示碳骨架拓扑结构与磁序/拓扑序之间的定量构效关系; (3) 探索量子自旋液体等新物态; (4) 解析自旋态的退相干机制并发展抑制策略; (5) 发展电子自旋共振耦合的扫描隧道显微镜等原位高分辨表征技术, 实时观测自旋关联与纠缠演化。最终推动其在室温长相干量子比特、高灵敏拓扑传感器及高密度自旋存储器等原型器件中的应用, 为未来量子信息技术奠定基础。

5.1.5 表界面离子化学

离子是物质科学中的基本粒子之一, 广泛应用于储能离子电池、磁性材料制备、核素分离等领域. 表界面离子化学注重可控制备单离子、溶剂化离子、离子对、离子配合物及聚集体等多层次离子体系, 探究表界面离子的溶剂化结构、迁移动力学以及性能调控机制. 发展单离子制备与软着陆技术, 精确表征表界面离子及其配位体系电子结构和光学性质, 定量描述离子间相互作用能及其在外场刺激下的动态响应, 建立离子-配体间的电荷转移与能量传递微观模型; 剖析离子溶剂化结构及其对离子活性的作用机制, 建立离子-分子特异性结合与指纹鉴定策略, 实现目标离子的高选择性捕获与识别; 阐明金属离子对反应能垒与路径的调控作用, 特别是电/热催化过程中离子的动态作用机制; 开发基于开尔文探针力显微镜和量子探针扫描隧道显微镜以及超快光谱等超高时空分辨的表征技术, 实时监测溶剂化离子迁移与跨介质界面输运行为, 建立真实的溶剂化离子模型, 发展非均匀介质理论, 将离子化学研究推至新的科学高度.

5.1.6 特种元素材料表界面物理化学

稀土(特别是4f区镧系元素)材料化学在工业应用中发挥着重要作用, 是稀土材料从基础合成到工业应用的核心桥梁. 揭示稀土表界面的电子结构与能态调控规律对于稀土材料的开发和应用至关重要. 稀土材料的表界面物理化学是研究稀土基材料表界面区域的原子排布、电子结构、化学成键、能态分布及界面作用规律以及表界面理化性质与宏观性能(催化、磁学、光学、电化学、力学等)关联的核心内容, 其内涵聚焦于表界面结构特殊性、电子态特异性、界面作用耦合性三大核心维度. 稀土材料表界面物理化学的核心是4f和5d电子主导的电子结构特性, 这是其区别于非稀土材料表界面的核心标志, 也是表界面性能的本源. 稀土材料表界面化学应重点关注: (1) 4f电子的局域性与巡游性耦合; (2) 多价态电子跃迁与氧化还原特性; (3) 表界面能隙与4f-5d、4f-4f电子能级调控; (4) 界面电荷转移与极化效应.

锕系材料表界面化学研究是核能源、核废料处置等领域安全服役的核心科学基石. 锕系金属铀和钚是核能应用的关键材料, 其高反应活性及辐照导致的表

界面化学腐蚀及表界面原子扩散问题严重制约了其工程应用. 解决此类工程难题, 关键在于深入开展表界面酸碱及氧化还原腐蚀机理的基础研究. 5f区锕系材料表界面物理化学是研究锕系元素(Th、Pa、U、Np、Pu、Am、Cm等)基材料表界面区域的原子排布、电子结构、化学成键、能态演化及界面作用规律, 揭示表界面微观理化特性与宏观服役性能(核相容性、腐蚀行为、辐照响应、界面输运、化学活性)关联的核心内容, 其涉及的关键化学过程包括: 环境气氛分子在金属或腐蚀层表面的吸附与解离、介质原子在材料体相中的渗透与扩散、金属与腐蚀层界面处的原子富集以及临界化学反应的发生. 由于铀、钚材料具有高放射性和强毒性, 实验研究面临诸多限制. 应优先发展基于相对论量子力学的理论化学方法, 从微观电子结构和化学成键出发, 结合表界面原子结构模型, 预测吸附能、扩散势垒、反应速率、量子隧穿几率等与腐蚀行为和原子扩散等密切相关的物理参数. 进一步结合机器学习技术, 构建材料微观结构与宏观腐蚀及原子扩散性能之间的构效映射关系, 从而为锕系关键部件材料的理性设计提供理论依据. 该研究对推动我国工业及相关科技发展具有重要战略意义.

5.1.7 软物质界面物理化学

软物质界面物理化学致力于突破传统“静态结构决定性能”的局限, 构建与认知具有环境感知与自适应能力的新型多层次界面体系, 并为生物医学、能源环境和智能材料等领域提供重要的物理化学基础. 未来研究的重点突破有以下四个方面: (1) 发展跨尺度理论建模与智能计算方法, 融合人工智能与多尺度模拟, 建立微观作用与宏观行为的有效关联; (2) 发展原位动态分析与先进表征手段, 系统揭示从分子到宏观尺度的结构演化与响应机制; (3) 研究多场耦合下界面组装、输运与相变行为的动态调控机制; (4) 设计智能响应型软物质界面, 开发可感知环境并自适应调控的功能软物质体系, 实现在生物医学、能源环境和智能材料等领域的应用.

5.1.8 多场耦合的界面电化学

界面电催化作为电化学研究的核心领域, 聚焦于电场与化学场耦合作用下的界面电荷转移、分子相互作用及结构演化规律, 为能量转化、物质合成与信息

传递提供理论基础. 重点研究电子转移的化学选择性, 深入解析电极表面化学环境对电子转移过程的调控机制. 在电化学能量转化领域, 固态电池和氢能技术的瓶颈均指向复杂工况下的动态界面问题. 需发展原位表征与人工智能辅助的研究范式, 实现从原子层级到器件尺度的界面动态解析与调控, 破解能量转换器件性能与可靠性难以兼顾的难题.

重点研究方向包括: (1) 电子转移的化学选择性调控, 包括质子协同电子转移、界面功能环境构建及手性电催化等; (2) 人工智能辅助创制新型关键材料, 如非贵金属催化剂和固体电解质; (3) 发展多尺度理论与工况表征技术, 解析多场耦合下界面动态演化机制.

5.2 面向国家重大战略需求与经济主战场

5.2.1 氢能的高效转化与利用

绿氢是我国能源低碳转型的战略组成部分. 通过可再生能源电解水制取绿氢, 并将其转化为便于储运的液态燃料, 是氢能高质量发展的重要路径. 核心问题是提高各个能量转化环节的效率, 须从基础层面入手厘清从光能到化学能转化全过程的微观机制. 研究将聚焦于电极/电解质界面的质子耦合电子转移, 突破质子隧穿驱动的加氢反应动力学, 揭示界面结构与催化活性/稳定性关系, 建立从微观反应到宏观系统的跨尺度模型, 推动低能耗、大规模绿氢制取与转化. 在此基础上, 发展人工光合成体系, 实现光、电、氢过程深度耦合, 构建太阳能驱动的氢能高效转化与利用新原理.

5.2.2 化石资源定向精准转化

天然气、煤、石油等化石资源的清洁高效利用是保障国家能源安全和实现“双碳”目标的战略基石. 如何实现高端化、多元化、低碳化和节能降耗, 仍是化石资源转化利用领域的重大挑战. 亟需发展分子水平定向催化转化方法, 提高原子经济性, 并注重高附加值化学品与材料的合成. 针对轻烃高值化利用, 发展脱氢、偶联及官能团化等新反应; 围绕重质烃与稠环化合物转化, 探究高选择性裂解与温和开环反应机制, 构建其定向反应策略; 聚焦合成气转化选择性调控, 构筑新型多功能催化体系, 开拓直接合成醇、酸、酯等高值含氧化合物新路线; 发展天然气利用新途径, 实现甲烷等惰性分子的温和活化与可控C-C偶联直接获

取化学品, 并探索甲烷与二氧化碳、煤等资源共转化新路线. 通过揭示C-H、C-C、C-O等关键化学键的定向活化与转化机制, 开拓新反应路线, 设计高效催化体系, 实现高选择性转化, 为促进相关化工过程转型升级和能源产业可持续发展提供科学支撑.

5.2.3 面向碳循环的催化新过程

在“双碳”目标背景下, 重点关注可再生/可循环碳资源如生物质、废塑料、二氧化碳等的高效催化转化制高值化学品与燃料. 通过对C-H、C-C和C-O键定向活化及C-C、C-X键偶联等关键基元步骤的深入研究与精准调控, 实现高效碳循环. 发展生物质“催化解聚—官能团重构—全组分利用”新路线, 实现其高效转化制备绿色聚合物单体、药物中间体和高密度航煤等, 为新型生物质炼制提供理论基础和关键技术支撑. 针对废塑料的高效利用, 突破分子结构复杂、键能高、流体性质特殊等瓶颈, 发展废塑料中特定化学键选择性断裂和重组方法, 阐明熔融态下的界面传质规律, 实现废塑料的“断链—功能化—重组”, 推动其从“降级回收”走向“升级再造”. 针对二氧化碳资源化利用, 耦合可再生光/电能或绿氢, 发展热催化、光催化、电催化以及多能量场耦合驱动的二氧化碳催化转化新过程, 理性设计并构筑具有多位点协同功能的催化体系, 实现温和条件下二氧化碳与其他分子的高选择性耦合转化与高值利用. 发展绿电驱动的分质精准转化方法, 突破电-热耦合催化、中温质子传导材料、电极-电解质界面调控等关键科学与技术问题, 建立短流程、低能耗的电解合成新过程.

通过特定化学键的定向活化及精准转化, 并耦合可再生能源, 开拓生物质、废塑料、二氧化碳等的循环升级新路线, 为建立碳循环利用的绿色碳科学与技术奠定基础.

5.2.4 多孔催化材料表界面化学

分子筛等多孔材料在石油炼制、煤化工及可再生碳资源转化等领域具有重要地位. 该领域应重点发展多尺度分子模拟和精准表征方法, 解析分子筛等多孔材料三维孔道和等级结构成核、生长与调控机制, 实现从理性设计到定向合成; 根据特定反应需求构建分子筛等孔材料三维结构, 探讨亚纳米空间内活性位点及局部电场对客体分子的协同激活作用, 研究多功能

位点与反应扩散耦合机制; 构建吸附-扩散-反应跨尺度耦合模型, 搭建高效扩散等级孔材料催化反应网络, 利用人工智能辅助设计实时描述客体分子扩散行为, 解决多组分与低含量活性位点的定量检测与化学态分辨问题, 建立分子分布、动力学演化与催化性能的关联, 实现微观至宏观尺度上分子筛等多孔材料催化反应耦合传质传热的反应器优化设计。

5.2.5 先进工业制造中的表界面化学

针对合成氨、合成气与天然气化工等重要工业过程, 通过催化剂与反应过程创新, 构建短流程、低能耗的催化新途径, 实现工艺流程绿色再造。传统合成氨过程能耗高, 需发展光、电、磁、等离子体等外场驱动的低温低压新反应路径, 系统解析催化剂表界面氮气分子解离、氢物种反应性及中间物种转化的关键步骤, 从原理上突破传统哈伯法对高温高压苛刻条件的依赖。同时, 系统突破催化剂规模化可控制备、反应器-工艺匹配与过程强化、系统能量集成优化以及数字化和智能化调控等关键技术, 为流程再造提供核心方法学支撑。

芯片制造中的电子电镀是实现纳米级互连与微纳结构精密成形的关键技术, 其发展水平直接决定了芯片产业能力。其核心挑战是精准控制极端受限空间内多组分复杂体系的电化学沉积过程。该领域亟需加强基础研究, 系统理解金属电沉积的成核生长动力学与添加剂作用机制, 揭示纳米至原子尺度镀层结构的动态演化规律, 建立镀层结构与电学性能的构效关系。通过解决芯片互连、三维封装及高密度集成中的表界面基础科学问题, 推动原子尺度精准沉积技术的实现。

针对先进工业制造中的极限精度与功能集成的迫切需求, 表界面原子制造正成为突破器件性能瓶颈和推动制造范式升级的重要方向。通过对表界面原子级反应、迁移与重构过程的精准调控, 实现原子逐层构筑、缺陷可控引入及异质界面定向组装, 是实现新一代高性能器件与功能材料的关键。亟需发展基于表界面化学反应的原子级制造新原理, 构建可编程、可预测的原子制造方法体系, 系统揭示原子尺度结构对电学、光学、磁学、力学及量子性质的决定作用, 为先进芯片制造、能源器件及高端功能材料提供共性技术支撑。

5.2.6 光电功能材料与器件中的胶体超结构

胶体颗粒的可控制备与超晶格结构构筑是胶体与界面化学及多学科交叉的前沿方向, 其核心是实现材料从微观构建到宏观功能的跨尺度研究, 建立结构有序性与协同物性之间的内在联系。该领域面向新一代光电功能材料与器件, 围绕新型胶体粒子及组装基元的设计制备、形貌控制、界面分子修饰与功能调控, 发展超晶格构建策略, 揭示其热力学与动力学规律, 构建复杂多级结构(如非密堆积、手性、可重构等体系), 解决多尺度组装、表界面调控及跨尺度制备等基础科学问题, 为实现先进光子材料、高性能介电、半导体与铁电材料的关键突破提供支撑, 并推动柔性电子、电磁调控与新型光电功能材料的发展。

5.2.7 储能界面电化学

储能界面电化学主要探究电化学反应发生条件下化学电源内部多相、多尺度界面上的电荷转移与存储规律, 其电荷传递效率与界面稳定性直接决定了电池的关键性能。针对电动汽车、无人机、智能电网以及空天探测等领域对高能量密度、高安全性电池的战略需求, 建立基于非均匀非连续界面的电/热/力多场耦合电子/离子跨尺度传输模型; 发展可适配固体电解质、高浓电解液、多孔/超厚电极等的电极过程动力学; 构建新型电化学储能系统(如固态电池、有机电池、液流电池、水系电池、柔性电池等); 建立极端环境下电化学界面演变的人工智能辅助表征、解析与预测技术。

5.3 面向人民生命健康

5.3.1 生物制造中的催化基础

化学生物融合催化是催化科学与生命科学的深度交叉前沿。建立并发展化学与生物催化功能互补、过程协同的新体系, 突破单一体系局限, 探究超越自然与传统化学边界的化学生物融合催化新机制, 实现淀粉、蛋白质、药物、高端精细化学品等的高效合成, 建立跨学科融合的催化研究新范式。着重探究化学催化与细胞工厂的耦合路径, 揭示多活性中心或跨体系间的物质与能量传递规律, 提高物质与能量转化效率, 解决反应条件兼容性与生物相容性的难题, 实现从简单底物到复杂分子的高效合成。同时注重仿生催化研究, 在分子与材料层面模拟生命体系的催化本质, 借

鉴酶活性中心的精确结构、微环境调控及协同机制,设计与合成高性能催化剂,以实现“学习自然、超越自然”的目标。

5.3.2 电化学信息转化与脑机接口

电化学信息转化是利用电化学特有的电子/离子界面实现生命体系化学信息的传感、转录和调控,已经在人工耳蜗、神经性疾病治疗等方面取得应用,在备受关注的脑机接口技术研发中具有重要的基础科学性。该领域致力于揭示生物分子与电极界面的电子转移及信息转录机制,为活体分析与疾病诊断提供新方法。主要研究内容包括: (1) 建立系统科学视角下的生物电化学界面与体系; (2) 发展高性能生物电化学功能器件与高通量、集成化、智能化系统; (3) 开发数智赋能的脑机接口与类脑智能技术以及临床可用的生物电化学诊疗系统。通过基础研究与应用转化协同培育创新产业生态,推动电化学生物传感器和脑机接口等产业与技术升级,突破国际技术垄断,增加我国在生物电子领域的话语权。

5.3.3 面向生物医药的亚稳态组装体系

面向生物医药领域的重大需求,精准构筑亚稳态组装体系,研究非平衡态下跨尺度分子自组装的物理化学规律,实现高度动态、自适应的递送与诊疗系统的构筑。研究主要涵盖以下三个方面: (1) 解析组装过程中多重非共价作用的协同与竞争、非平衡态动力学控制及复杂熵焓调控规律,发展能量流驱动的耗散自组装理论,实现亚稳态组装体相变的级联触发与智能调控; (2) 研究液-液相分离凝聚体、非共价玻璃、凝胶及胶体马达等亚稳态组装体系的结构特征、界面效应与动态行为,阐明其从亚稳态向稳态演化的路径与机制,发展相应的可控构筑与调控策略; (3) 构建高度可控、可编程的智能功能系统,探究其在生物复杂环境中的动态性、自适应性及响应性行为,进而实现对重大疾病的精准干预与高效治疗。这些研究将为智能响应生物材料、新型药物递送系统及仿生人工细胞的设计提供理论基础与技术支撑,并推动其在生物医药领域的创新应用。

5.3.4 仿生限域界面与流体输运

仿生界面化学是我国具有国际影响力的前沿方

向,以自然生物界面为蓝本,研究多相界面中的物质输运、外场响应及跨尺度调控规律,为黏附/润滑、低能耗化工、能量转换、高效分离及人机接口等领域提供科学基础。该领域的核心科学问题包括: 生物界面功能的形成原理、限域结构对分子/离子电子态与输运行为的影响机制。研究重点包括: (1) 仿生界面的构建方法,界面黏附、润滑、输运等功能的物理化学本质; (2) 仿生限域界面对流体行为及反应活性的调控机制; (3) 面向极端环境的高性能界面材料跨尺度仿生创制; (4) 在超低能耗合成、限域微加工、能量转换等关键领域的应用探索。通过构建结构多级、功能精密的仿生限域界面体系,精准调控分子结构与物质输运,有望推动化工、能源、材料等领域的绿色转型,对形成颠覆性技术、抢占未来科技制高点具有重要战略意义。

6 本学科领域发展的保障措施与政策建议

根据催化与表界面化学的重要学科地位及自身发展特点,完成上述重点发展方向与优先领域的研究任务,取得颠覆性原始创新成果,需采取切实可行、综合有效的政策保障措施,提升科学基金的资助效能。

加强重大科技任务的顶层设计和战略布局。“十四五”后期,国家自然科学基金委员会(以下简称“基金委”)作为主责单位承担部分重大专项和国家重点研发计划重点专项的立项工作。面向国家重大战略需求和科学前沿,建立战略科学家研讨立项机制,组织做好基础研究和应用基础研究战略布局,加强顶层设计,做好有组织的科研,是基金委面临的新挑战和重任。

探索重大非共识项目的遴选与资助机制。重大非共识项目是基础研究中最具原创性的项目,是未来产生诺奖级创新成果的基石。这类项目与基金委常规项目的遴选机制差异很大,需要有符合科学探索性的争论和战略决策机制,允许具有高风险、高原创性的研究方向通过差异化评审机制获得持续资助。

在常规项目评审、立项与资助管理方面,完善专家遴选机制和项目评价体系。积极推动“一键”指派系统的完善;进一步简化项目同行评议表结构与评价内容,函评意见要重点强调拟解决科学问题和研究创新性等核心评审要素,将评审重心回归科学问题本身,聚焦研究方案的可行性与新颖性,推进项目评审的精

准化、科学化和规范化;依据学科基础性与重要性,确保经费和资源配置与学科地位及实际贡献相匹配。在保证研究类资助项目数稳定增长的同时,加大项目资助强度与学科权重比例。在项目结题管理及评价时,强调重大科学问题与原创贡献,弱化单一论文指标评价,推动分类评价与多维考核机制。优化科研成果评价体系,将算法平台、开源代码、数据库构建与知识图谱形成纳入科研绩效考核指标,推动科研成果形式的多元化、可复现与可持续发展。

在资助研究平台建设方面,设立面向基础理论的专项基金,鼓励底层算法、建模理论及跨尺度模拟方法的原始创新研究,弱化短期的功利性导向思维,强化“从0到1”和源头技术储备研究。建设国家级开放模拟平台与高质量数据库,由权威科研机构牵头,构建可拓展、能共享的全过程数据库与模拟系统。建设国家级动态表征中心,推动大科学装置智能化升级及多模态平台共建共享。

将研究项目与高端人才培养有机结合起来,遵循科学发展规律,健全人才选拔机制,鼓励学科交叉、团队协作与平台共享。加强跨学科的复合型人才培养力度,支持研究团队的长期稳定合作,形成创新合力,避免内卷式竞争。强化交叉型青年人才培养机制,鼓励具有数理基础与材料背景的复合型青年人才参与催化与表界面化学基础研究。

加强基础研究成果转化机制探索 and 平台建设,对

具有潜在重大应用价值或学科引领意义的研究成果开展持续滚动支持。完善研究成果转化渠道,推动成果与国家重大工程、行业龙头企业及应用场景的有效对接。在二氧化碳转化、绿色氢能与氨合成、燃料电池等关键能源技术研发中引入先验理论模型模块,实现实验设计与理论指导高度融合,推动产学研深度协同,提升研发效率与成果转化能力。

加强监督体系建设,维护科学基金项目公平公正性,坚决抵制任何形式的学术不端行为,加大惩戒力度,营造风清气正的科学氛围,持续推进学术道德建设。

提倡敢为人先、宽容失败的健康科学文化,鼓励学术争鸣与科学批判,推动国内外内涵性学术交流,全面提升我国催化与表界面化学的原始创新能力与国际竞争力,培养新质生产力,为我国能源与资源利用、原子和智能制造、健康与安全保障等提供基础科学原理与核心技术支撑。

与学科“十四五”规划^[1]相比,学科“十五五”规划的保障措施更注重长周期支持、智能化科研体系与平台共建共享;在创新文化引领下,弘扬科学探索精神,构建面向未来的系统性创新生态。未来五年,我国催化与表界面化学不仅要服务于国家重大战略需求,而且要引领全球催化与表界面化学的创新性研究,制定国际规则,建立研究范式,成为推动科技强国战略和全球能源与材料创新的基础科学高地。

致谢 感谢学科“十五五”发展战略规划顾问专家组、专家组和秘书组以及所有参与研讨和提出建议的专家们,感谢所有为各领域战略规划研讨会提供支持的单位和科研人员。

参考文献

- 1 Gao F, Yi X. *Sci Sin Chim*, 2021, 51: 932–943 (in Chinese) [高飞雪, 伊晓东. 中国科学: 化学, 2021, 51: 932–943]

Strategic development of catalysis and surface/interface chemistry of the National Natural Science Foundation of China for the 15th Five-Year Plan

Feixue Gao^{*}, Peng He

Department of Chemical Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085, China

**Corresponding author (email: gaoxf@nsfc.gov.cn)*

Abstract: Within the framework of the “Fifteenth Five-Year Plan” of the National Natural Science Foundation of China (NSFC), this report systematically outlines the scientific essence, strategic significance, and development pathways of catalysis and surface/interface chemistry based on national strategic demands and long-term objectives of this discipline. It provides an in-depth analysis of the current research landscape in China and major challenges confronting this discipline, and identifies key directions and priority areas requiring breakthroughs over the next five years. On this basis, this report further proposes NSFC policy considerations and supporting measures aimed at fostering the sustainable development of the discipline. These insights are intended to offer a strategic reference for the systematic planning and high-quality advancement of catalysis and surface/interface chemistry in China during the “Fifteenth Five-Year Plan” period.

Keywords: catalysis and surface/interface chemistry, discipline development planning for the 15th Five-Year Plan, research landscape of the discipline, priority funding areas

doi: [10.1360/SSC-2026-0040](https://doi.org/10.1360/SSC-2026-0040)