# 草酸二甲酯加氢催化剂研究：解锁三类高价值化学品定向合成

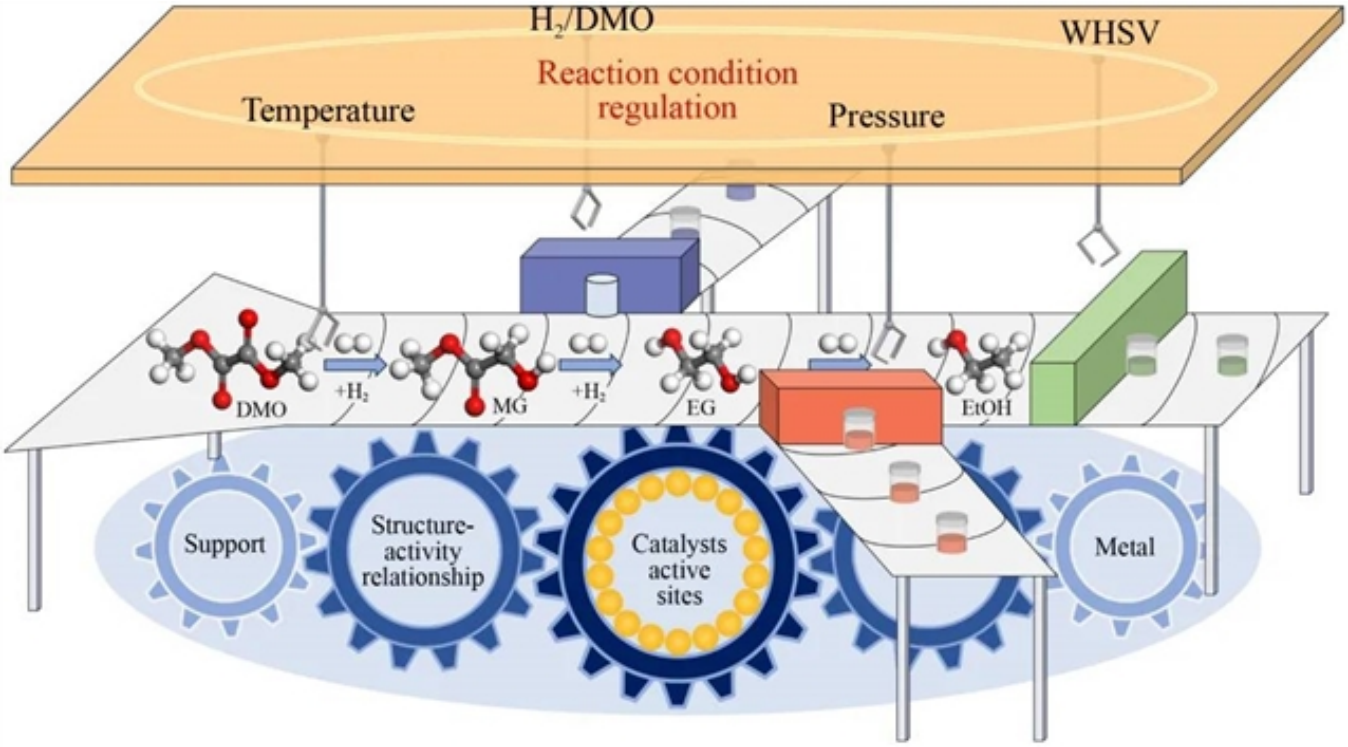
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/42336.html

*本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！*

**草酸二甲酯加氢催化剂研究：解锁三类高价值化学品定向合成**。 研究背景

在我国石油资源短缺、煤炭资源丰富的能源背景下，煤基化工的高效利用成为化工领域研究热点。草酸二甲酯（DMO）作为煤基合成气的重要衍生物，其逐步加氢可定向制备乙醇酸甲酯（MG）、乙二醇（EG）和乙醇（EtOH）三类高价值有机化工原料，而催化剂的设计与优化是实现这一过程的核心关键。近期发表的综述论文系统梳理了DMO逐步加氢催化剂的研究进展，聚焦铜基、银基、过渡金属基等催化剂的活性位点和构效关系，明确了不同产物的定向催化规律，同时剖析了当前的研究瓶颈并讨论了未来的研究方向，为煤基含氧化学品的高效合成提供了重要理论支撑。




综述亮点

三大维度破解定向加氢难题

催化剂体系聚焦核心，铜基成工业化主力

本文全面梳理了各类催化剂在DMO三步加氢反应中的应用，指出铜基催化剂因低成本及优异的酯加氢能力成为研究与工业化的核心选择。其催化活性的关键在于Cuo/Cu+的协同作用：Cuo负责氢气的解离，Cu+吸附并促进DMO分子解离及稳定反应中间体，二者的比例平衡是精准调控加氢程度和实现目标产物定向合成的核心。而银基和过渡金属基（磷化物/碳化物/贵金属）催化剂则各有优势，为MG和EtOH的高选择性合成提供了更多可能性。

图表直观解析机制，关键结构助力性能提升

论文通过多幅关键图示，将抽象的催化机理与催化剂结构调控直观呈现，让核心规律一目了然。

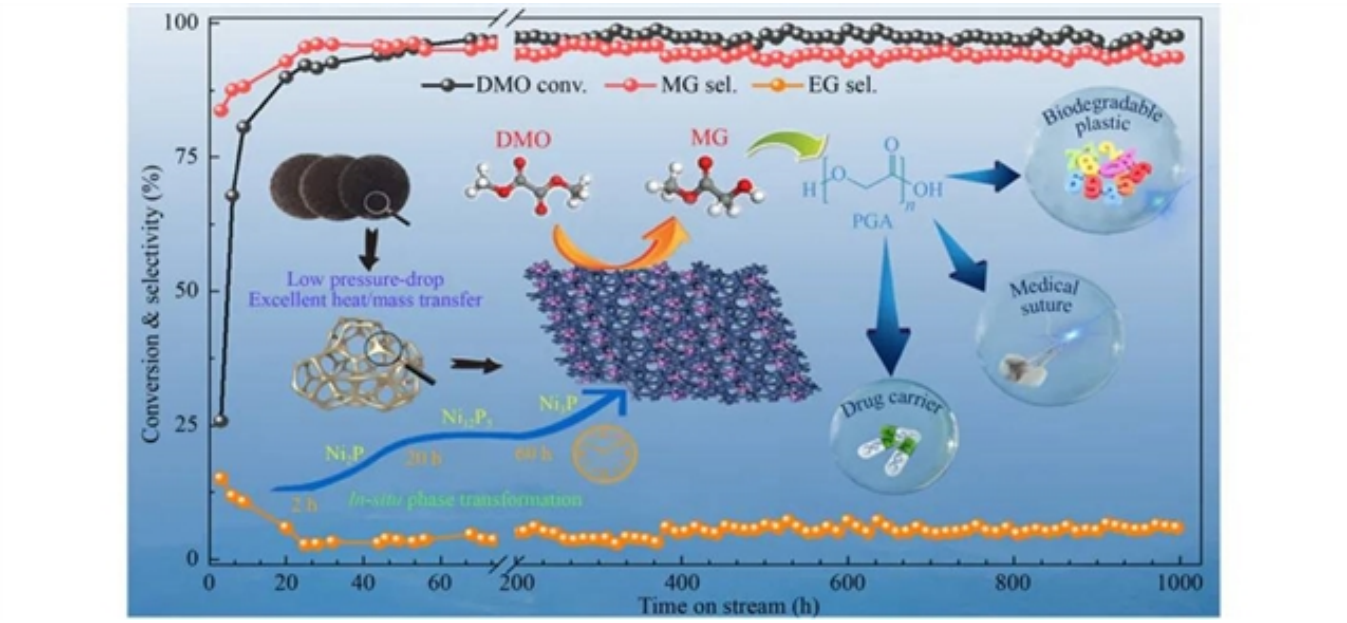



图1.泡沫镍结构纳米多孔Ni3P催化剂（图4）可实现DMO近100%转化，MG选择性＞95%，稳定运行1000 h无失活，直接印证了过渡金属磷化物的优异催化性能。

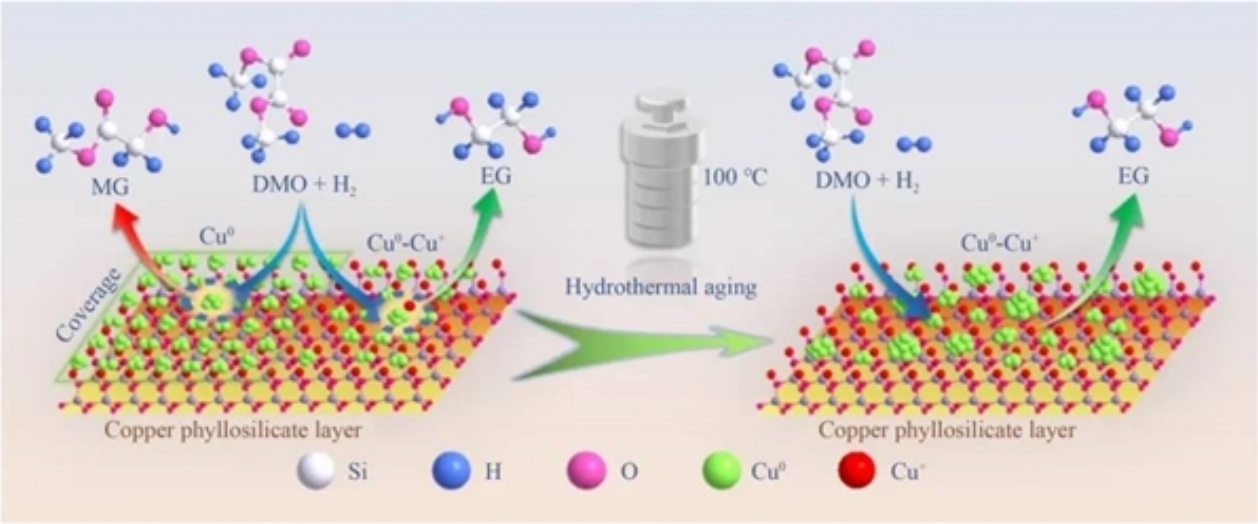



图2.水热老化调控Cu-SiO2催化剂（图5），优化了Cu+在铜层状硅酸盐层间的分散性，进一步强化Cu+与Cuo的协同作用，显著提升EG合成效率。

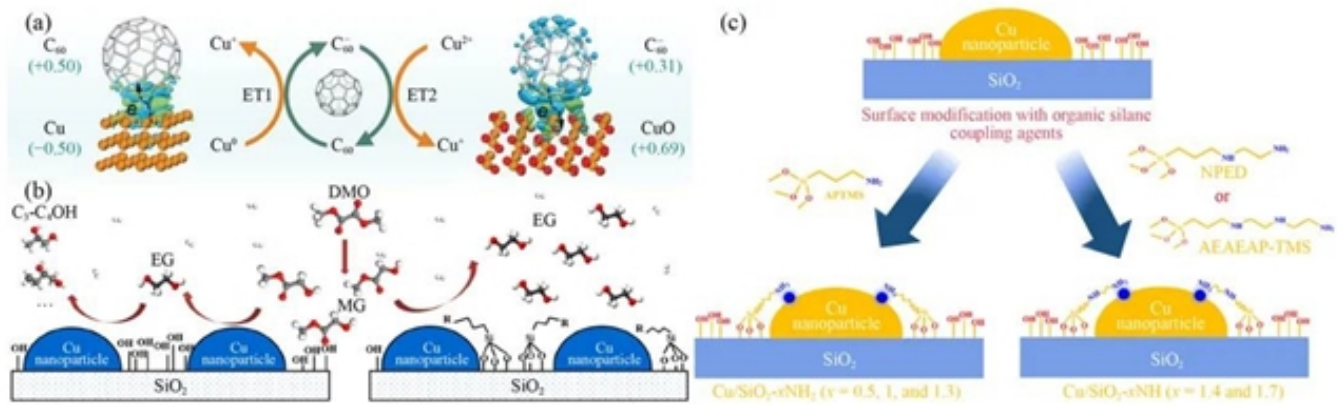



图3.C60与硅烷偶联剂修饰铜基催化剂（图8），通过电子转移效应稳定Cu+价态，抑制其向Cuo或Cu $^{2}$ +转化，有效解决了催化剂易失活的问题。

定向催化规律明确，精准调控加氢程度

综述指出，研究人员通过大量实验与理论计算，明确了MG、EG、EtOH三类产物的最优催化条件与核心机制，实现了DMO加氢程度的精准调控。

MG（部分加氢）：需低氢酯比和低压条件，银基催化剂粒径约5.3 nm时选择性最优，过渡金属基通过电子缺陷或高表面电子密度抑制深度加氢；

EG（中间加氢）：中温中压为最佳条件，铜层状硅酸盐为关键活性结构，通过金属掺杂、表面修饰等手段稳定Cu+比例，平衡Cuo/Cu+协同作用；

EtOH（深度加氢）：需高温高氢酯比，Fe5C2为核心活性中心，让DMO先加氢为乙酸甲酯（MA）而非EG，降低EtOH合成活化能，同时需降低催化剂碱位点，抑制C3-C4OH副产物生成。

核心结论

目前通过催化剂设计与反应参数调控，已实现DMO加氢各产物的高转化率与高选择性（＞90%），其中铜基催化剂凭借低成本、高催化活性的优势，仍是工业化应用的核心选择，而过渡金属基催化剂则展现出良好的应用潜力，为后续研究与工艺优化提供了新方向。

各类催化剂的性能优化均围绕三大核心展开：活性位点精准调控、金属物种分散性提升、金属-载体相互作用强化，这也是未来催化剂设计的核心思路。

现存瓶颈

尽管研究取得显著进展，但当前DMO加氢催化剂研发仍面临四大核心问题，成为工业化升级的制约因素。

长期稳定性不足：高温、高氢酯比的操作环境下，催化剂易发生烧结、积碳、硅流失等问题，且稳定性测试条件不统一，数据缺乏对比性；

反应机理未完全阐明：理论研究多局限于铜基催化剂，模型过于简化，DMO加氢的完整反应网络与关键中间体的演化规律尚不明确；

活性位点争议尚存：Cuo/Cu+在各加氢步骤的具体作用、层状硅酸铜的形成机制与构效关系，仍需更深入的研究验证；

研发效率偏低：催化剂设计仍以经验试错为主，缺乏高通量筛选与精准预测方法，失活机制复杂且无可靠的寿命预测模型。

未来展望

针对上述问题，本文为未来DMO加氢催化剂的研究指明了四大核心方向，助力实现高稳定、高选择性、高活性催化剂的理性设计。

表征与模拟融合：结合原位XRD、DRIFTS、XPS等原位表征技术与DFT计算，解析反应过程中活性位点的动态演化与中间体转化规律；

机器学习赋能研发：基于DFT计算与实验参数构建机器学习模型，实现催化剂配方的高通量筛选与性能精准预测，提升研发效率；

建立通用理论模型：突破催化剂特异性限制，开发适用于各类催化体系的微动力学模型，阐明DMO加氢的通用反应路径；

标准化测试与模型构建：制定催化剂稳定性测试的统一标准，收集海量数据构建神经网络模型，实现催化剂失活机制与寿命的精准预测。

DMO逐步加氢技术作为煤基化工的重要方向，其催化剂的研发升级直接关系到煤基含氧化学品的工业化效率与成本。此次综述的研究成果，为后续催化剂的理性设计与工艺优化奠定了坚实基础，也为煤基化工的绿色、高效发展提供了新的思路与方向。

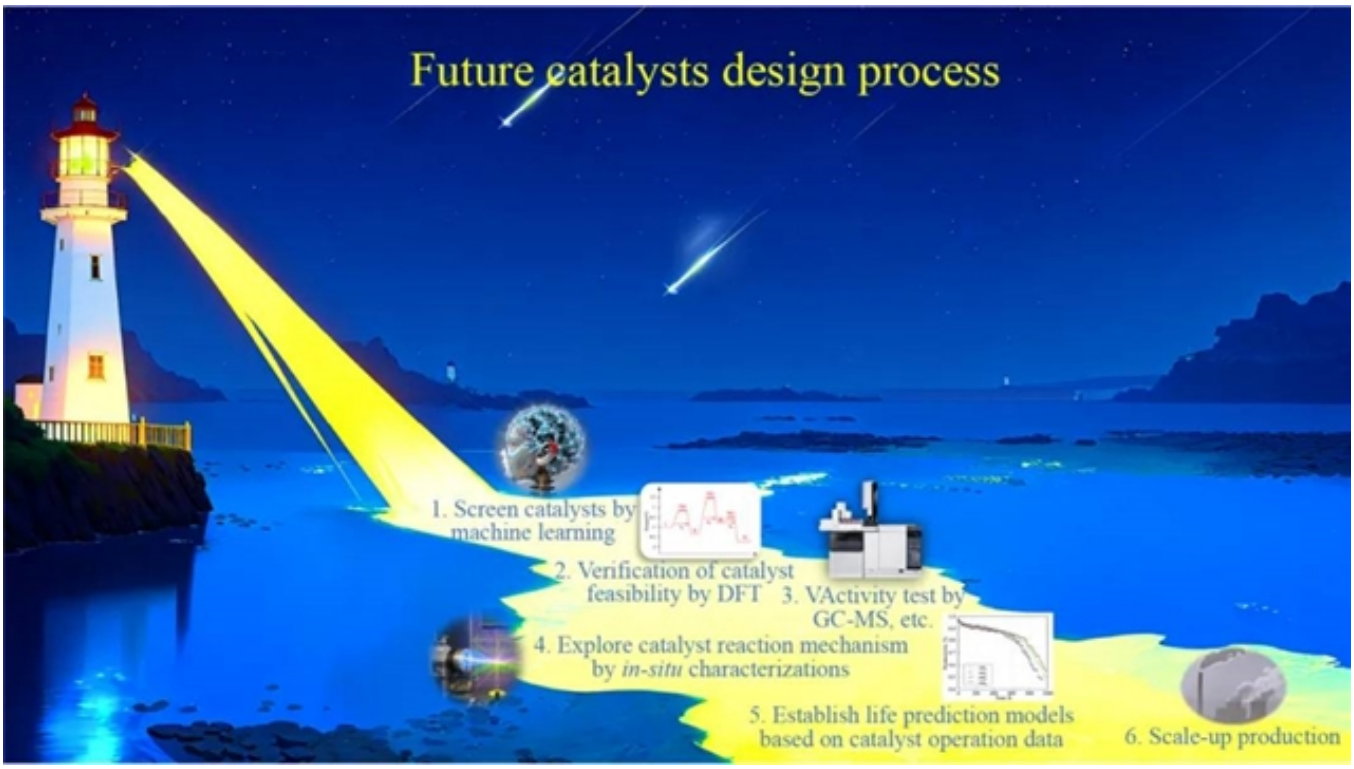



图4.未来DMO加氢催化剂设计流程示意图。该图是整篇综述核心思想的凝练与可视化呈现，完整勾勒出了未来DMO加氢催化剂从经验试错向理性设计转型的全流程。图示形成了原位表征+计算模拟解析反应机理-机器学习高通量筛选与性能预测-催化剂定向合成-性能验证-数据反馈优化模型的闭环研发逻辑，明确了未来催化剂设计需融合多尺度表征、理论计算、数据科学与实验验证，打破传统试错研发的桎梏。（来源：EngineeringJournals微信公众号）

相关论文信息：

https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2623-0

作者：罗昕天等 来源：《工程·化学工程》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发