

高通量工作流程强化多相催化的过去、现在与未来

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/42744.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！

高通量工作流程强化多相催化的过去、现在与未来。

以金属、金属氧化物和分子筛为核心体系的多相催化是化工与能源行业的基础支撑，但传统单样品逐一测试的试错式催化剂开发与优化方法，存在耗时久、成本高、人力投入大的突出短板。过去数十年间，高通量工作流程（High Throughput Workflow, HTW）技术逐步发展为变革性研发范式，可实现大批量催化剂的快速合成、性能筛选、物性表征与数据分析。在多相催化研究领域，普遍认为高通量工作流程能够大幅缩短高性能催化材料的发掘周期，完整绘制复杂的组成-活性-选择性-稳定性关联图谱，厘清复杂的催化剂构效关系。尽管该技术已取得较多应用和重要进展，但该领域仍存在多项亟待解决的瓶颈问题。展望未来，高通量工作流程与自主实验平台、人工智能、机器学习、实时原位动态表征及数据科学的深度融合，将开辟全新研究前沿——不再仅依靠高通量实验数据得到简单统计结果，而是依托海量数据集实现对催化体系本质机理的深度解析。西安交通大学常春然教授团队在中国工程院Engineering集群分刊ENG. Chem. Eng.就多相催化实验领域的高通量工作流程技术发表观点类文章。

现代高通量工作流程形成五环节自主闭环催化研发全链路体系

经过多年技术迭代，当前多相催化领域已形成一套成熟先进的高通量工作流程，整体由实验设计、催化剂合成、催化性能筛选、催化剂表征及数据处理分析五大环节构成的可自主循环的完整闭环。

实验设计依托统计学方法、机器学习和主动学习搭建多元化催化剂库，基于研究目标和历史数据，机器自主规划全新或后续实验方案；

自动化机器人平台实现浸渍、水热等多种工艺批量制备催化剂，配套程序化后处理保障样品可重复性；

多通道并行反应器搭配在线联用分析仪器，短时间批量采集气液相催化反应海量性能数据；

全套物化表征手段实现高通量并行检测，借助AI视觉技术加速透射电镜图谱解析，同步开展测试与表征；

机器学习和大语言模型整合制备、工况、性能、表征多维大数据，自主解析催化体系规律并合理指导下一轮实验。

高通量催化剂筛选技术存在多维度固有瓶颈，制约工业化落地应用

尽管高通量工作流程可大幅提升催化剂研发效率，但该技术仍存在诸多难以忽视的短板，限制其筛选结果的可靠性与规模化应用。

1、工况与尺度存在显著鸿沟：高通量实验原料纯度高，催化剂为微小粉末，微型反应器床层温压梯度、传质扩散条件和工业装置差异巨大，筛选得到的活性和选择性规律无法直接复刻到工业化场景；且主流高通量设备仅支持1~10bar低压运行，难以匹配甲醇合成、CO₂加氢等15~100bar高压工业反应，高压商用设备通道少、成本高昂；

2、漏斗式分级筛选机制存在缺陷：依靠短时单一活性指标逐层淘汰超95%的催化剂样品，极易错失高压、长时活化后性能优异的潜力材料；同时初筛仅检测数十分钟短时活性，缺少工业必需的数十至百小时稳定性评价，存在高活性催化剂快速失活的研发失败风险；

3、行业基础设施与数据体系不完善：整套高通量工作流程设备投入成本高昂，仅有少量实验室具备使用条件，完整闭环流程应用案例稀缺；行业缺少符合FAIR规范的标准化开源数据集与统一实验协议，公开实验数据储备不足，这些都阻碍了领域整体技术协同发展。

面向全自主化与多学科融合的高通量催化研究技术未来发展路径

当前高通量工作流程虽能加速催化剂筛选，但仍难以直接产出适配工业应用且机理清晰的催化材料，针对前文梳理的各类技术短板，未来高通量工作流程技术将朝着全自主、一体化、高精度、可解释、可预测的方向迈进，核心发展思路分为四点：

1、深度融合自主驱动实验室，结合机器人、大语言模型与强化学习搭建全闭环研发体系，实现从文献调研、实验执行到数据分析、方案决策的自主运行，同时保留人机协同的顶层专家决策；

2、搭建多模态数据生态，开发高通量原位动态表征技术及AI自动电镜解析技术，借助3D打印技术定制催化剂与反应器，缩小微尺度筛选与工业装置的鸿沟，构建催化数字孪生体系；

3、推动理论计算与高通量实验双向耦合，将DFT第一性原理计算、机器学习势函数、微观动力学模型融入研发流程，先用计算完成预筛选，再通过实验验证/校正理论预测，提升模型机理解释与外推能力；

4、建立统一标准化实验基准与符合FAIR原则的开源多维数据集，解决实验重复性差和行业数据孤岛问题。

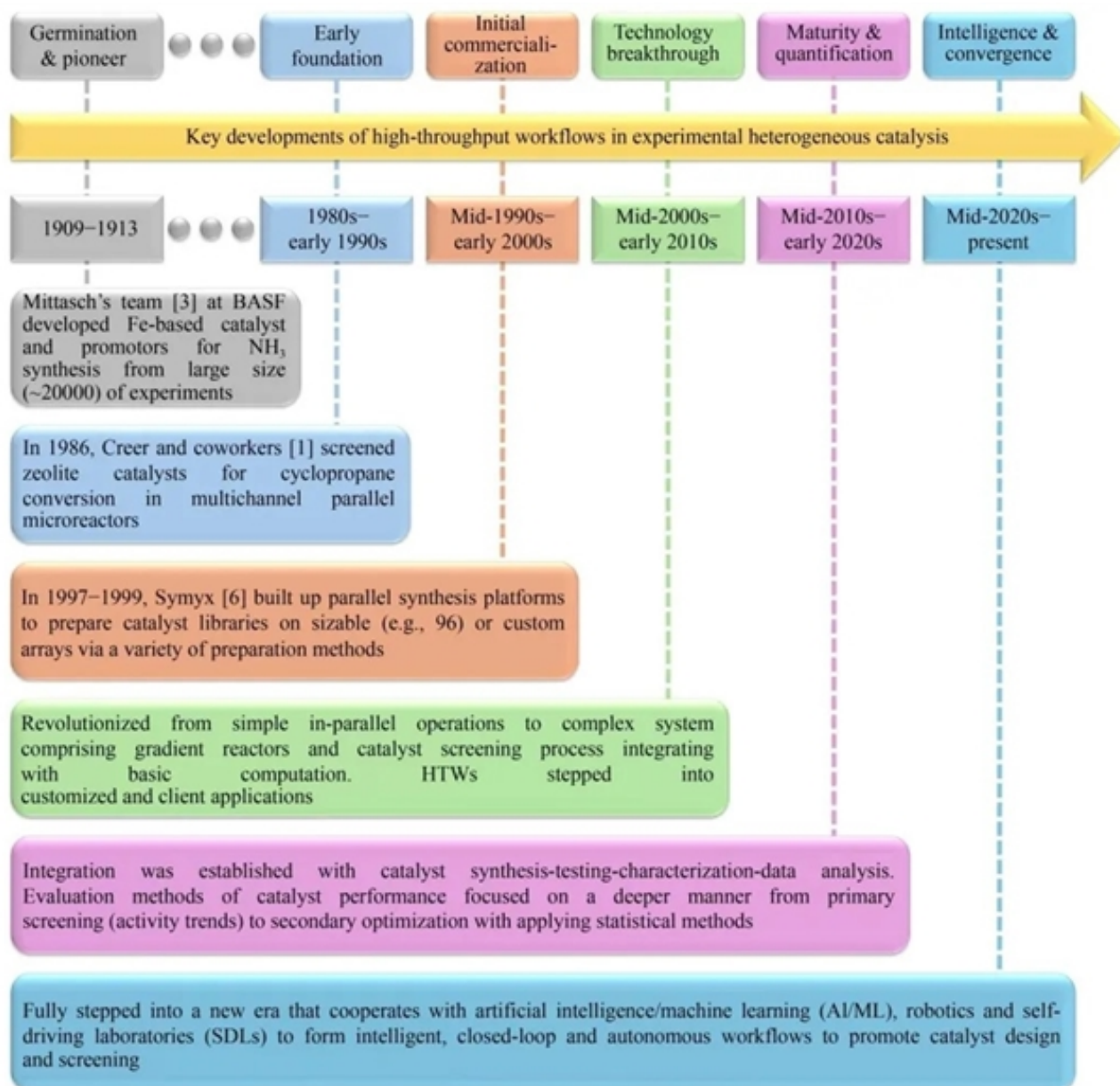


图1.多相催化实验领域高通量工作流程的关键发展历程

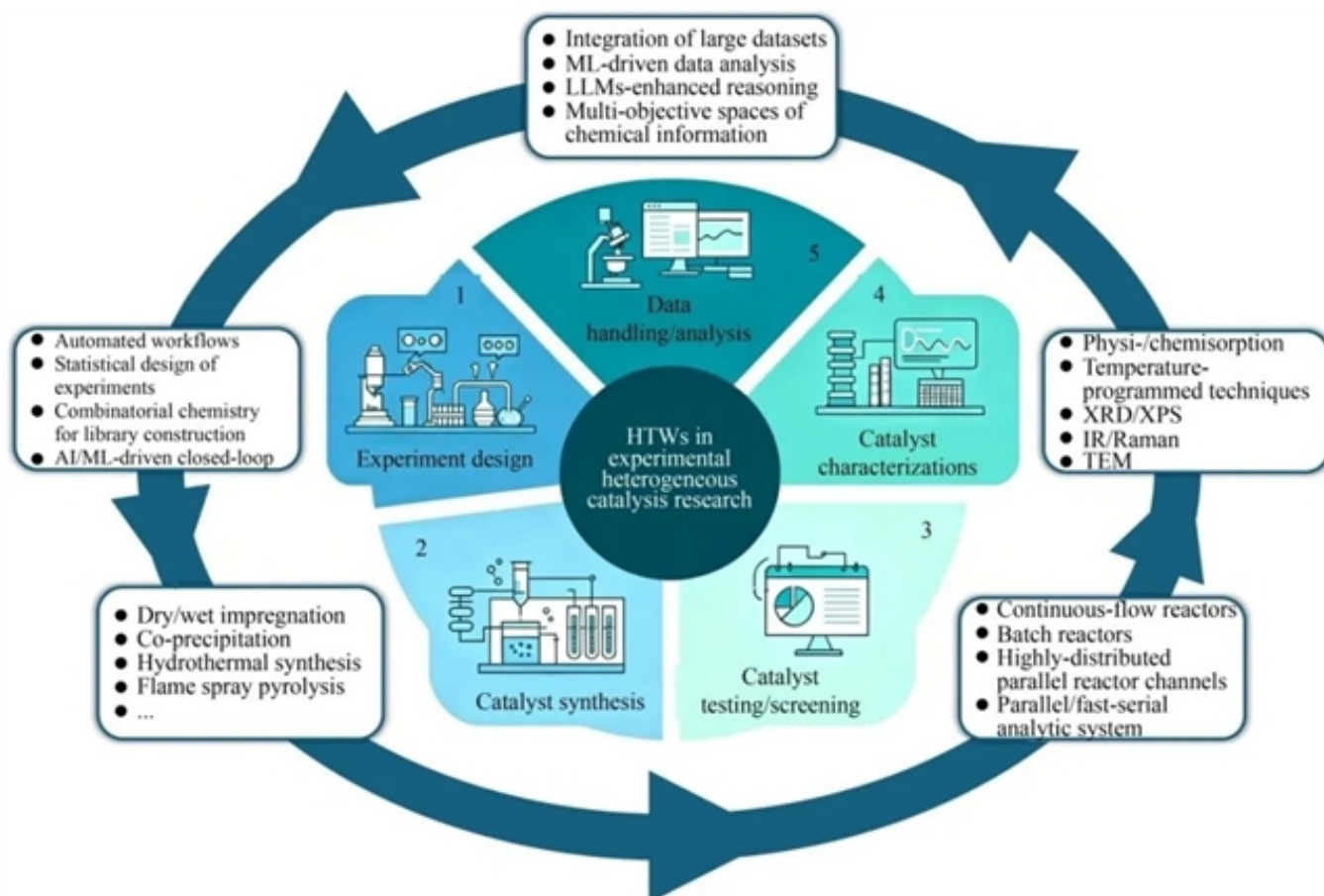


图2.多相催化实验领域高通量工作流程的前沿模式

(来源：EngineeringJournals微信公众号)

相关论文信息：<https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2691-1>

作者：常春然等 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](https://www.iikx.com)转发