

拟提名 2024 年大连市自然科学奖项目公示

项目名称：等离子体协同催化技术中微孔增强放电机理的研究

提名者：大连理工大学

一、提名意见：

与传统催化法相比，等离子体催化法有效地结合了催化剂的高选择性和低温等离子体的高活性，因此得到了人们的广泛关注，并被应用于二氧化碳等温室气体的转化中。催化剂颗粒之间及其孔隙结构内部能否形成微放电并产生稳定的等离子体，是提高等离子体催化效率的关键之一。本项目针对等离子体协同催化技术中微孔增强放电的机理开展了深入研究，取得的主要原创性成果包括：（1）首次通过模拟揭示了在氦气放电中，当微孔尺寸大于 10 微米时，其内部即可发生微放电过程，且活性粒子的产生过程随着微孔尺寸的增加而逐渐增强。（2）模拟发现当催化剂的相对介电常数较低时（低于 200），微孔内部更易发生微放电；与圆柱形的微孔相比，圆锥形的微孔内部更易产生等离子体。

（3）针对 N₂/O₂ 混合气体放电，揭示了正、负流注的传播特性与差异，以及光电离是导致纳米尺寸的微孔内部产生活性粒子的主要原因。上述发现对于深入理解等离子体催化过程中的协同作用有重要的参考价值，并可以为等离子体催化过程的优化提供理论指导。相关成果发表在 *Applied Catalysis B: Environmental*（影响因子 22.1）以及低温等离子体最重要的期刊 *Plasma Sources Science and Technology* 等上，被国内外同行引用 280 余次。鉴于此，本单位提名该项目为大连市自然科学奖一等奖。

二、项目简介：

随着工业化的快速发展以及化石燃料的大量使用，排向大气中的二氧化碳、甲烷等温室气体急剧增加，导致气候异常等一系列问题的出现。因此，减少温室气体的排放、阻止全球变暖已经成为了国际社会的共识，我国政府也提出了 2030 年"碳达峰"与 2060 年"碳中和"的目标。而将温室气体转化成具有高附加值的燃料或化学品，是实现"双碳"目标最有效的途径之一。

等离子体催化法有效地结合了等离子体的高活性与催化剂的高选择性，因此被广泛地应用于温室气体的转化中。在一段式等离子体催化结构中，等离子体与催化剂直接接触并发生作用，可以实现较高的能量效率及更好的选择性，即产生所谓的"协同效应"。等离子体催化中的协同效应十分复杂：一方面，等离子体放电产生的大量活性粒子，会通过表面反应和能量传递影响催化剂的特性，如其表面形貌、氧化态、功函数、催化活性等。另一方面，催化剂的存在，也会影响局部的放电过程，进而改变等离子体特性。尤其是在催化剂颗粒之间或催化剂孔隙内部，增强的电场会导致微放电的形成，进而改变局域的电子动理学行为，并最终影响等离子体催化的效果。

本项目针对等离子体协同催化技术中微孔增强放电的机理开展了深入研究，取得了如下原创性成果：

(1) 首次通过模拟揭示了等离子体催化中，微孔结构内部活性粒子的来源。在氦气放电中，当微孔尺寸大于 10 微米时，其内部即可发生微放电过程，并形成稳定的等离子体，且活性粒子的产生过程随着微孔尺寸的增加而逐渐增强。

(2) 揭示了催化剂的材料属性和表面形貌对于微孔结构内部放电过程的影响。当催化剂的相对介电常数较低时(低于 200)，微孔内部更易发生微放电；而随着相对介电常数的增加，微孔内部活性粒子的产生过程受到抑制。此外，与圆柱形的微孔相比，圆锥形的微孔内部更易产生等离子体。

(3) 针对等离子体协同催化中采用的填充床介质阻挡 N₂/O₂ 混合气体放电，首次通过模拟揭示正、负流注的传播特性与差异，证明负流注相较于正流注更容易穿透进入催化剂微孔，而且光电离机制使得纳米尺寸的微孔内部也会产生一定浓度的活性粒子。

上述发现对于深入理解等离子体催化过程中的协同作用有重要的参考价值，并为等离子体催化过程的优化提供了理论指导。相关成果发表在 *Applied Catalysis B: Environmental* (影响因子 22.1) 以及低温等离子体最重要的期刊 *Plasma Sources Science and Technology* 等上，五篇代表性论文被国内外同行他引 280 余次。

三、代表性论文专著目录(不超过 5 篇)

序号	论文专著 名称/刊名 /作者	年卷页码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	发表 时间 年月 日	通讯 作者 (含共同)	第一 作者 (含共同)	国内 作者	他 引 总 次 数	检 索 数 据 库	论文署 名单位 是否包 含国外 单位
1	Can plasma be formed in catalyst pores? A modeling investigation/Applied Catalysis B: Environmental/Yu-Ru Zhang, Koen Van Laer, Erik C. Neyts, Annemie Bogaerts	2016 年 185 卷 56-67	2016 年 5 月 15 日	Annemie Bogaerts	张钰如	张钰如	127	SCI	是
2	Influence of the Material Dielectric Constant on Plasma Generation inside Catalyst Pores/Journal of Physical Chemistry C/Yu-Ru Zhang, Erik C. Neyts, Annemie Bogaerts	2016 年 120 卷 25923-25934	2016 年 11 月 17 日	张钰如	张钰如	张钰如	70	SCI	是
3	Formation of microdischarges inside a mesoporous catalyst in dielectric barrier discharge plasmas/Plasma Sources Science and Technology/Ya Zhang, Hong-yu Wang, Yu-ru Zhang, Annemie Bogaerts	2017 年 26 卷 054002	2017 年 5 月 1 日	Annemie Bogaerts	张雅	张雅 王虹宇 张钰如	48	SCI	是
4	Enhancement of plasma generation in catalyst pores with different shapes/Plasma Sources Science and Technology /Yu-Ru Zhang, Erik C Neyts, Annemie Bogaerts	2018 年 27 卷 055008	2018 年 5 月 15 日	张钰如	张钰如	张钰如	27	SCI	是
5	Positive and negative streamer propagation in volume dielectric barrier discharges with planar and porous electrodes/Plasma Processes and Polymers/Quan-Zhi Zhang, Li Zhang, De-Zheng Yang, Julian Schulze, You- Nian Wang, Annemie Bogaerts	2021 年 18 卷 2000234	2021 年 2 月 15 日	张丽 王友年	张权治	张权治 张丽, 杨 德正, 王友年	11	SCI	否
合 计							283		

四、主要完成人(完成单位)

序号	完成人姓名	完成单位	工作单位
1	张钰如	大连理工大学	大连理工大学
2	张权治	大连理工大学	大连理工大学
3	张雅	武汉理工大学	武汉理工大学
4	王友年	大连理工大学	大连理工大学