

# 化学新材料在化学工程与工艺中的应用及未来趋势

朱东华 (昆明市中航磷化工有限公司, 云南 东川 654100)

**摘要:** 随着化学工业的快速发展, 传统材料已难以满足化学工程与工艺在高效、环保、节能等方面的需求, 化学新材料应运而生并逐渐成为推动该领域革新的核心力量。本文系统分析了高温聚合物电介质、单原子催化剂、共价有机框架材料及光催化产氢材料等新型化学材料在化学工程中的应用。研究结果表明, 这些材料通过结构设计与功能优化, 显著提升了能源转换效率、反应选择性和工艺可持续性。未来趋势表明, 随着人工智能、高通量计算等新研发模式的应用, 化学新材料的开发正从传统“试错”模式向精准“智能设计”转变。

**关键词:** 化学新材料; 化学工程与工艺; 应用分析; 未来趋势

中图分类号: TQ03 文献标识码: A 文章编号: 1674-5167 (2025) 032-0016-03

## The application and future trends of new chemical materials in chemical engineering and technology

Zhu Donghua (Kunming Zhonghang Phosphorus Chemical Co., LTD., Dongchuan Yunnan 654100, China)

**Abstract:** With the rapid development of the chemical industry, traditional materials have been unable to meet the demands of chemical engineering and technology in terms of high efficiency, environmental protection, and energy conservation. As a result, new chemical materials have emerged and gradually become the core force driving innovation in this field. This paper systematically analyzes the application of new chemical materials such as high-temperature polymer dielectrics, single-atom catalysts, covalent organic framework materials and photocatalytic hydrogen production materials in chemical engineering. The research results show that through structural design and functional optimization, these materials have significantly enhanced energy conversion efficiency, reaction selectivity and process sustainability. Future trends indicate that with the application of new R&D models such as artificial intelligence and high-throughput computing, the development of new chemical materials is shifting from the traditional “trial and error” model to precise “intelligent design”.

**Key words:** New chemical materials Chemical Engineering and Technology Application analysis Future trends

化学工程与工艺是现代工业社会发展的基石, 一直以来都致力于物质转化过程中的优化和革新。而在这个过程中一个核心动力就是化学新材料不断地取得突破和广泛地应用。在全球能源转型、环境保护以及可持续发展需求日益紧迫的背景下, 传统化工材料及工艺已经很难适应新时期高效、清洁以及精准制造等需求<sup>[1]</sup>。化学新材料以特殊的分子结构设计及功能调控正在深刻地改变化学工程过程效率、产品性能及系统可持续性。近年来, 化工领域功能性新材料的创新性应用呈现多元化、精准化、智能化趋势<sup>[2]</sup>。在高温储能聚合物、单原子催化剂、共价有机框架、光催化产氢材料等新材料方面取得了突破性进展, 不断拓展化学工程的应用边界。因此, 对化学工程和工艺中化学新材料的运用进行深入的研究, 既有利于促进化工技术向着高效化、绿色化和低碳化方向发展, 也可以增强中国化工产业核心竞争力, 迎接全球化工产业变革所带来的机遇和挑战。

### 1 化学新材料在化学能源存储与转换中的应用

#### 1.1 高温聚合物电介质薄膜

高性能聚合物电介质作为薄膜电容器核心的储能材料, 其对于电动汽车、可再生能源发电以及其他关

键设备的性能与效率有着直接影响。传统的聚丙烯薄膜电容器在高温状况下容易出现能量密度降低以及电容稳定性不足等问题, 这致使它难以契合现代电力系统对高温稳定性的严格要求。为应对这一技术挑战, 清华大学的研究团队运用了机器学习的辅助设计策略, 成功研发出一种结合宽带隙与高电子亲和性的分子填充材料, 将其引入到聚合物基体之后, 复合电介质的性能有了明显改善。该创新材料设计具有诸多优点: 填料高电子亲合可以有效俘获电子、宽带隙阻碍电子迁移, 以协同抑制电介质内电荷迁移, 并减小泄漏电流密度。实验结果表明, 制备的复合电介质在250℃高温下实现了5.1J cm<sup>-3</sup>的能量密度(充放电效率为90%), 并且在600MV m<sup>-1</sup>高电场中实现了20万次稳定循环, 表现出高达大部分常规聚合物电介质材料的特性。更为引人注目的是, 课题组利用自主构建的卷对卷流延设备, 成功地在千米级以上连续制备出复合电介质膜, 促进这种高性能材料由实验室走向工业化生产。

#### 1.2 光催化产氢材料

氢能这一清洁能源载体的绿色制备技术已成为人们关注的焦点。新型结构反应器采用纳米复合材料对光催化剂进行包埋, 在以塑料废弃物为原料连续制取

表 1 光催化产氢材料性能对比

材料类型	产氢效率 (L/m <sup>2</sup> · day)	稳定性 (天)	适用塑料种类	反应条件
传统光催化系统	0.18-0.30	10-20	PET、PLA	高温高压
新型纳米复合催化系统	0.906	60+	PET、PLA	常温常压
理想目标性能	>2.0	>90	包括 PE、PP 等	常温常压

氢气方面取得了突破性进展。该技术的意义是创新性地将塑料污染与清洁能源生产两大环境挑战融合在协同解决方案中。这一技术核心是在材料层面上进行革新：通过设计疏水性优良的纳米复合材料来提供高效的光催化剂“防护服”，从而避免直接暴露在碱性溶液中被腐蚀。同时，该设计使得催化剂可以如荷叶般飘浮于溶液的表面，有利于与反应物的充分接触。在光照条件下，被良好保护的催化媒介将塑料（如 PET）重整为氢气和高价值化学品（例如乙二醇、对苯二甲酸等）。实验结果表明，与传统的光催化系统相比，该系统在产氢效率上有 3-5 倍的提升，最高可以每天产生 0.906 升氢气，并且能够稳定运行超过 60 天。光催化产氢材料的特性比较传统催化系统材料性能见表 1。

该技术突破了传统光催化系统面临的稳定性差、产氢速率低等技术瓶颈，尤其适合在光照充足的荒漠地区进行户外大规模塑料垃圾的分布式处理，有望为全球塑料污染治理和绿氢生产提供新范式。

## 2 化学新材料在化学催化工艺中的应用

催化过程是现代化学工业的“心脏”，约 90% 的化学制品生产涉及催化步骤<sup>[3]</sup>。催化新材料的研发不仅会对反应效率产生影响，而且还会对资源利用率、能源消耗以及环境污染等关键问题产生直接影响。近年来单原子催化剂，共价有机框架材料以及其他新型催化材料不断涌现，正在促使催化工艺朝着原子经济性和绿色化高要求转变。

### 2.1 单原子催化剂与原子经济性

贵金属催化剂在许多化学反应过程中展现出优异的活性，但是它们的高成本和资源稀缺性极大地限制了规模化工业应用。传统的催化材料中，贵金属原子容易团聚形成更大的粒子，造成大量原子被埋在粒子内不能参与表面反应的现象，原子利用率一般较低。面对这样的挑战，原子抽提技术取得了重大突破，在丙烷脱氢转化为丙烯的反应中，贵金属原子的利用率接近 100%。这项技术的主要优点是显著提高了贵金属原子的暴露和可接触性，从而减少了贵金属的使用量大约 90%，同时还维持了出色的催化活性和选择性。丙烯这一重要化工原料在生产过程中长期面临着催化剂成本居高不下和对贵金属资源依赖性大的瓶颈问题，这一工艺为丙烯及整个化工行业的发展提供了

低成本和可持续发展的技术途径。这一技术在解决特定反应效率的同时，也为设计下一代高效催化剂提供了一种崭新的思路。经过深入研究，发现这一成果达到了近乎 100% 的贵金属原子的使用效率，这为设计高效的催化剂提供了新的方向，并有望推动化学工业朝向绿色和低碳的方向发展。

### 2.2 共价有机框架 (COFs) 材料

共价有机框架 (COFs) 是一类具有原子级精准拓扑结构与可调控孔道特性的晶态多孔材料，因其可设计的功能性和高比表面积而成为催化领域的明星材料。然而，传统 COFs 合成高度依赖动态可逆共价键，导致材料化学稳定性欠佳，限制了其实际应用前景。单原子骨架编辑策略利用不可逆的卡特里茨基型反应，突破了传统动态共价化学的局限。其已通过单原子氧 - 氮置换反应，构建出两种新型吖啶盐基 COFs 材料 (Acr-TAPB 和 Acr-TADB)，这些材料具有优异结晶度、突出化学稳定性和高效电荷分离能力<sup>[4]</sup>。这一材料设计策略的巧妙之处在于，通过精确的骨架编辑实现了 COFs 材料功能的定制化调控，为多相催化剂设计提供了新思路。所得材料在批次与流动化学反应器中均可实现克级规模合成应用，且能保持长时间反应稳定性，展现出良好的实际应用潜力。

### 2.3 智能设计范式加速催化剂开发

传统的催化剂研发中的“试错”模式存在周期长、成本高和效率低的问题，这已经成为限制新材料创新的主要障碍。近年来，通过多尺度 AI 预测框架的搭建，催化剂开发已逐渐由经验探索转向智能设计。这一框架涉及 3 个关键环节：一是引入表面性质基础模型，可以对晶体材料表面能及平衡形貌进行精准预测，相比传统密度泛函理论在计算效率上提高了五个量级；二是利用 AI 驱动高通量催化剂甄别策略可以在成千上万的候选物质中迅速鉴别出性能优异的新型单原子催化剂；最后，结合过渡态智能筛选方法，使过渡态搜索效率提高了近万倍，并显著降低催化反应路径优化周期。这种智能预测模式不仅大幅提升了催化剂研发效率，更通过深入理解材料结构与性能间的构效关系，为催化剂的理性设计提供了理论基础。

## 3 化学新材料在绿色化工与可持续发展中的应用

### 3.1 生物基与可降解高分子材料

塑料污染作为当今世界最为迫切的环境问题，发

展可生物降解或者循环再生高分子材料已经成为一个重要的发展方向<sup>[5]</sup>。目前，在二维材料、光刻胶材料以及高分子智能材料这几个前沿领域中的革新正在逐渐打破传统材料不可降解以及资源消耗巨大的瓶颈。这些新材料不但在使用性能方面可以和传统塑料媲美，而且在其生命周期的末端还具有可降解或者可循环的特点，充分体现了绿色化工这一根本思想。近年来，涌现的低成本、多颜色和环境友好的应力发光材料和贵金属萃取用水凝胶吸附剂这类新型材料进一步充实环境友好材料体系。该类材料实现使用功能之后，通过自然降解或者安全回收可以显著减轻环境负荷，是一种切实可行的可持续发展材料路径。

### 3.2 污染控制与资源化材料

将污染物转化为有用资源是绿色化工的重要发展方向。光催化塑料转化制氢工艺的发展为废弃物资源化开辟了一条新的途径，这种工艺既可以使废弃塑料变成洁净的氢气，又可以联产高值化学品达到“以废治废”循环的目的。就生物质转化而言，生物基先进碳材料热化学制备技术能够实现农林废弃物向高性能碳材料的定向转化，有效地提高资源利用价值，并为固废资源化利用提供一条绿色可行的技术途径。从分子层面上看，高选择性吸附材料研究的开发还为污染物资源化研究提供了一条有效途径。比如，能特异性地吸附贵金属的水凝胶吸附剂可以高效地从电子废弃物中回收金和其他稀有金属，同时具有较好的生物相容性和环境友好性，从而进一步丰富资源回收用材料工具。

### 3.3 化工过程的绿色化替代

材料创新不仅体现在产品本身，也体现在化工过程的绿色化替代上。HA-R 催化剂及配套的高纯净聚丙烯生产技术在生产过程中就能实现产品的高纯化，灰分降低至 10–20 ppm，满足了电工级超纯聚丙烯材料的国产化需求。这种高纯化生产从源头减少了后续精制过程的能源消耗和废物产生，是过程绿色化的典型体现。

## 4 化学新材料研发模式的创新与未来趋势

### 4.1 数据驱动的新材料设计

数据驱动新材料设计正在从本质上改变着材料研究路径和效率。这一模型的核心是采用人工智能、机器学习以及高通量计算来构建由原子分子向宏观性能转变的预测模型，从而在大量候选材料中快速甄别并优化其性能，使研发周期由几十年减少到几年乃至几个月。具体地说，这一范式一般涉及到几个关键环节：最底层，利用“表面性质的基础模型”这类工具可以对晶体材料表面能及形貌进行准确预测，与传统的密度泛函理论相比，计算效率提高了几个量级；在中间

层，以 AI 为驱动力的高通量虚拟筛选框架可以从成千上万个候选者中迅速发现具有最佳目标性能的可能物质，例如新型单原子催化剂和高能量密度电介质；从反应机理层面上看，智能过渡态搜索框架能够使复杂催化反应路径解析效率提高近万倍。这一“全局设计”方式不但大大降低实验成本，而且更能找到很多人在体验上难以达到的构效关系并引导合成性能理想的新材料。

### 4.2 产学研协同创新模式

化学新材料研发存在投入大、周期长以及技术门槛高的特性，强化产学研协同创新成了加速科技成果转化、提升国家产业竞争力的关键途径。该模式旨在打破高校、科研院所与企业之间的壁垒，高校和科研机构在基础研究至技术开发再到产业应用的过程中，专注于前沿基础理论与底层技术突破，努力产出原创性知识成果。企业紧密对接市场需求，着重于工艺放大、稳定性测试、成本控制以及最终产品的产业化落地；政府及产业联盟等发挥桥梁作用，借助搭建创新平台、制定产业政策以及设立专项基金，引导创新资源向战略领域聚集。这种深度协同在加快技术迭代与运用之际，还构建起可持续的创新文化。让学术研究更贴近行业真实需求，避免研发资源浪费，同时帮助企业获取前沿技术，构筑核心技术壁垒。

## 5 结语

化学新材料是化学工程与工艺创新的关键要素，正凭借不断突破推动整个产业朝着高端化、绿色化以及智能化方向转变。从高温储能电介质至单原子催化剂，从共价有机框架到光催化产氢材料，新材料的创新应用切实提高了化工过程的效率、选择性与可持续性，促使其从传统试错转向理性设计。

### 参考文献：

- [1] 龙斌,徐向东,丁华亮.化学工程与工艺中绿色化工技术的应用分析[J].葡萄酒,2023(12):0141-0143.
- [2] 周江山,刘恺元,邵军强,等.烯马树脂无醛胶黏剂:新材料,新化学,高性能[J].高分子学报,2025.
- [3] 王明,周永芳,张哲铭,等.三乙酸甘油酯合成中催化剂与能耗的关键技术[J].塑料,2023(1):83-87.
- [4] 陈康,罗子木,孙桂林,等.不同盐离子对 I 型卡拉胶热塑成膜性能的影响[J].高分子材料科学与工程,2024,40(5):31-38.
- [5] 隋冲.化学工程与工艺中绿色化工技术的应用分析[J].山东化工,2023,52(13):131-132.

### 作者简介：

朱东华 (1975- )，云南昭通人，专科，工程师，目前主要从事化工分析方面的工作。