# 重庆市科学技术奖提名公示内容

（2020年度）

项目名称：**木质纤维素热解过程的微观机理**

提名者：重庆市教委

提名等级：自然科学奖二等奖

项目简介：

生物质是重要的可再生资源，它的能源化利用有助于我国可持续能源发展战略的顺利实施。生物质热化学转化作为生物质利用的前沿技术，具有良好的应用前景。但是生物质复杂组分的热解机理是该领域长期存在的研究难点。

本项目从微观角度，系统研究了生物质主要组分的热解行为，构建了基于分子层面的纤维素、木质素热解机理模型，并揭示了主要产物的生成机理，中间产物的演化过程。上述研究推动了生物质热化学转化基础理论的发展，为生物质的清洁高效能源化利用奠定了坚实的理论基础。

成果完成人长期从事生物质热解的基础研究，在该领域取得了一系列原创性成果。在项目起止时间内，课题组在该领域共发表SCI、EI、国内外学术会议等论文100余篇。相关成果受到了生物质能领域知名学者的广泛关注，产生了重要的学术影响。

代表性论文专著目录

1. Unveiling the initial pyrolytic mechanisms of cellulose by DFT study/Journal of Analytical and Applied Pyrolysis/Zhang, YY; Liu, C; Chen, X，2015年113 卷621-629页
2. Study of guaiacol pyrolysis mechanism based on density function theory/Fuel Processing Technology/Liu, C ; Zhang, YY; Huang, XL， 2014年123卷159-165页
3. Density functional theory studies on pyrolysis mechanism of beta-D-glucopyranose /Journal of molecular structure- theochem /Huang, Jinbao; Liu, Chao; Wei, Shunan, Huang Xiaolu, Li Haojie，2010年 958(1-3);64-67
4. Mechanism of glucose conversion in supercritical water by DFT study/Journal of Analytical and Applied Pyrolysis/Zhang, YY; Liu, C; Chen, X，2016年‏ 119卷‏ 199-207页
5. A new horizon on effects of alkalis metal ions during biomass pyrolysis based on density function theory/Journal of Analytical and Applied Pyrolysis/Zhang, YY; Liu, C， 2014年110卷 297-304页

主要完成人：刘 朝，李期斌、徐肖肖、黄金保，张亚运

完成单位：重庆大学