上海高研院二氧化碳加氢催化剂设计开发研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/10081.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！

近日，中国科学院低碳转化科学与工程重点实验室暨上海高研院-上海科技大学低碳能源联合实验室研究员孙予罕、高鹏和李圣刚带领的团队，在二氧化碳催化加氢催化剂研发中取得进展，实现了更高性能氧化铟催化剂的理性设计与合成，研究成果以*Rationally designed indium oxide catalysts for CO_2 hydrogenation to methanol with high activity and selectivity*为题，发表在*Science Advances*上。论文第一作者是上海高等研究院博士生党闪闪、秦斌。

二氧化碳催化加氢反应耦合太阳能、风能、生物质等可再生能源，是一条绿色、可持续的甲醇、汽油等液体燃料的合成途径，是循环经济包括“液态阳光”和“甲醇经济”的重要一环，也可用于其他基础化学品的合成，如烯烃、芳烃等。近年来越来越多的研究表明一些氧化物催化体系在该系列反应中具有优势，受到国内外研究者的关注，仍需进一步提升此类催化剂的反应性能，才有望继续扩大二氧化碳加氢工业应用领域的成果。

尽管已有不少报道探究了立方相氧化铟{110}表面催化二氧化碳加氢反应机制，该研究中，通过密度泛函理论计算发现该表面可形成两个截然不同的二氧化碳吸附结构，且分别对应于目标产物甲醇和副产物一氧化碳的生成路径。为了快速搜索更有利于甲醇生成的氧化铟催化剂，研究人员扩大了第一性原理计算范围，考察了氧化铟主要晶相及其相对稳定的晶面，并根据理论计算得到的反应路径建立了定性的催化性能预测模型。（图1）

根据理论模型预测，一种热力学亚稳定的六方相氧化铟的{104}表面会在二氧化碳加氢反应中表现出更高的活性和甲醇选择性。研究人员采用简单的合成方法制备出具有不同晶相和形貌的氧化铟材料，对它们进行结构分析和波谱表征，并考察它们在二氧化碳加氢反应中的催化性能，建立氧化铟催化剂的构效关系。其中，一种主要暴露了上述{104}晶面的六方相氧化铟纳米材料在反应中表现出最高的反应活性和甲醇选择性。另外，该材料即使在360摄氏度的热力学不利的高温反应条件下，仍保持极高的甲醇选择性（>70%），且该条件下甲醇的时空产率达到10.9 mmol/g/hour，远高于各种已报道的二氧化碳加氢制甲醇催化剂，包括传统氧化铟催化剂及铜基催化剂。（图2）

该工作展示了计算科学应用于工业催化剂辅助设计的潜力，其所发现的高性能氧化铟催化剂有望被用于二氧化碳加氢制甲醇的工业过程，也将推动二氧化碳加氢制低碳烯烃、汽油及芳烃等高碳烃的氧化物/分子筛双功能催化剂的研发与工业应用。

研究工作得到了中科院战略性先导科技专项（A类）变革性洁净能源关键技术与示范、国家自然

科学基金、国家重点研发计划、中科院青年创新促进会、上海市青年科技启明星计划、上海市人才发展基金等项目的资助。

论文链接

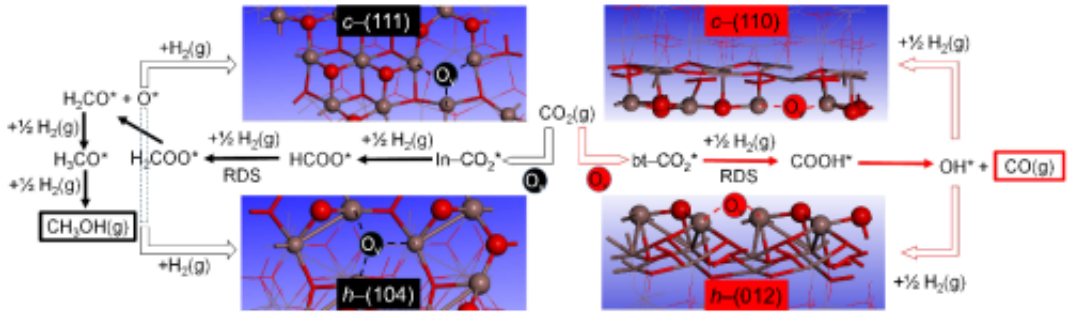


图1 不同立方相（c – In_2O_3）与六方相（h – In_2O_3）氧化铟表面上的CO2加氢最优路径示意图

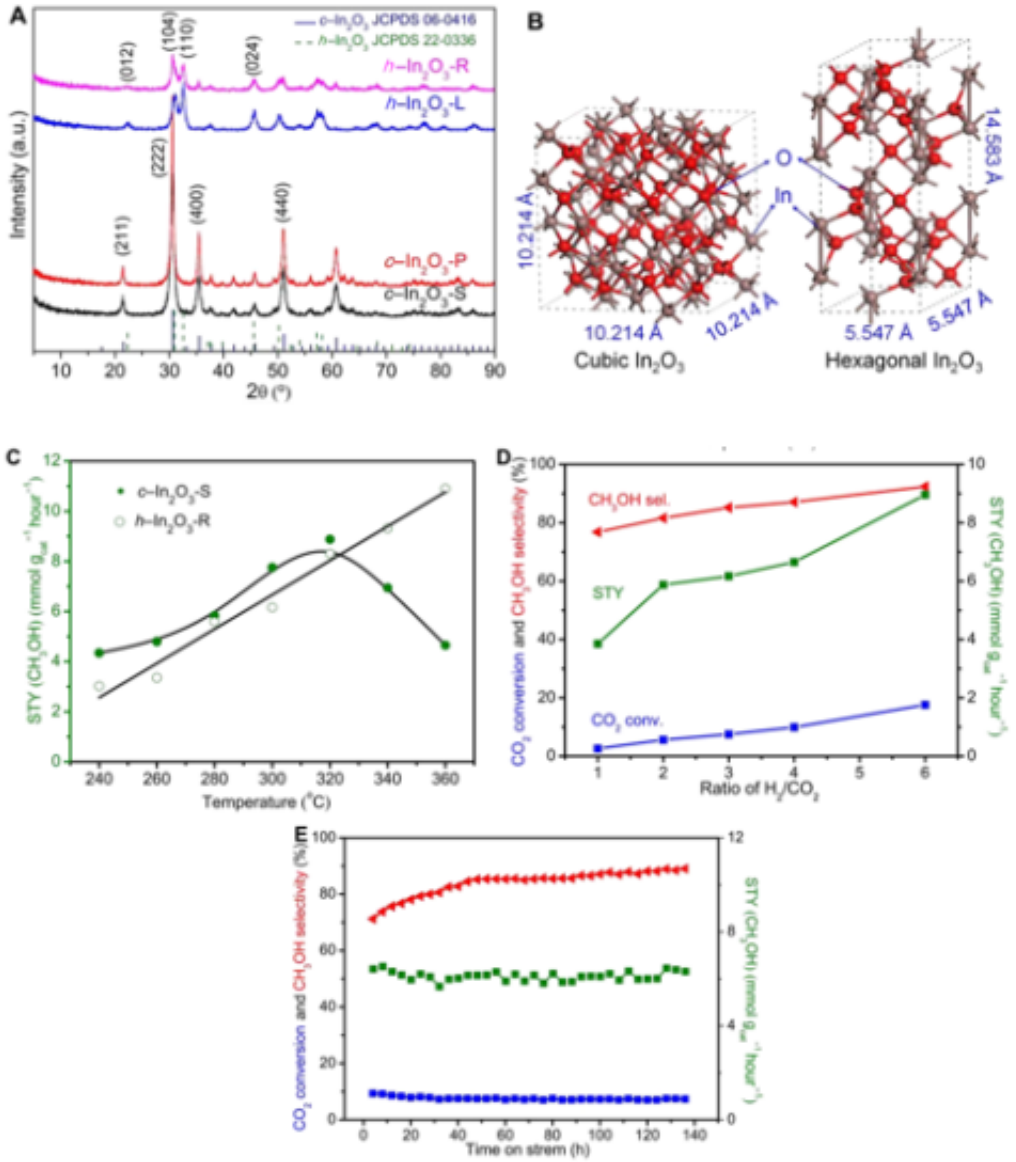


图2 所制备的氧化铟材料的结构表征与二氧化碳加氢反应性能

研究团队单位：上海高等研究院

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