# 合肥研究院在电催化肉桂醛选择性加氢研究方面取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/18949.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，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所环境与能源纳米材料中心在常温常压电催化肉桂醛（CAL）选择性加氢研究中取得进展。该工作合成了碳负载的铂修饰氧化钼纳米粒子催化剂（Pt-$MoO_3$/C），探究了其在电化学CAL选择性加氢中的性能，实现高效C=O选择性加氢生成肉桂醇（COL）。在有机合成工业中，α，β-不饱和芳香醛选择性加氢制备高附加值化学品具有重要意义。CAL是α，β-不饱和芳香醛中的代表化学品，具有多种合成路线，可用于生产日用化工产品和制药工业的中间体，其加氢产物COL通常作为香精添加剂应用于草莓、梨、桃、柠檬等花卉的香皂或化妆品香精中。此外，COL还可进一步合成肉桂酰氯，作为药物原料用于血管收缩或治疗癌症。电化学加氢作为一种高效的合成方法，具有一些明显的优点，如从水系电解液中获取安全的氢源、快速的反应动力学，以及温和的反应条件等。然而，还原电位下的析氢反应将会是竞争反应，需要合理控制，同时，电还原C=O键生成COL受到竞争反应C=C键还原的阻碍。从热力学和动力学的角度来看，CAL中C=C比C=O更容易被氢化。因此，需要设计一种克服能垒的催化剂选择性合成COL。

鉴
于此
，研究人
员采用有机液相法
合成了碳负载的铂修饰三氧化钼纳米
颗粒催化剂（Pt-$MoO_3$/C）。研究表明，催化剂中$MoO_3$
纳米颗粒分散在碳基底上，而Pt团簇修饰在$MoO_3$
表面。电化学测试发现，电解液中加入CAL后出现了明显的还原峰，且析氢反应被抑制。Pt-$MoO_3$
/C对反应物CAL的强吸附作用使得
表面CAL浓度比Pt/C和$MoO_3$
/C催化
剂更高，还原
峰发生了明显负移。对反应条件进行优化后，研究发现使用Pt-$MoO_3$/C作为催化剂在-0.4 V（vs. RHE）电位下，反应时间为两倍理论电量时，反应物几乎完全转化，此时对产物COL选择性达78%，电流效率约为50%。根
据密度泛函理论计算结果显示，Pt与$MoO_3$
之间的协同作用使得电子在$MoO_3$

（002）表面富集，CAL更倾向于以垂直吸附的构型吸附在表面，因此有助于C=O键优先加氢，选择性生成COL。该工作以抑制竞争反应以及调节反应物吸附构型为基础设计了催化剂，实现了对目标产物较高的选择性及反应效率，为生物质衍生有机物电催化选择性加氢反应催化剂的组分功能设计提供了新思路。

相关研究成果发表在*Chemical Communications*上。研究工作得到了国家自然科学基金的资助。

论文链接

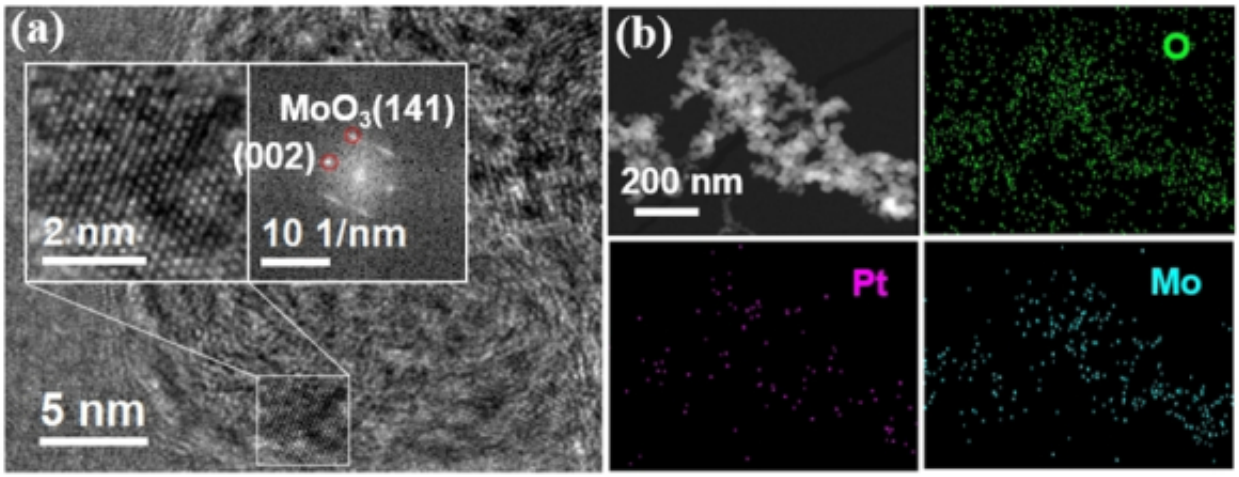



图1 Pt-$MoO_3$/C的HRTEM和能谱表征结果

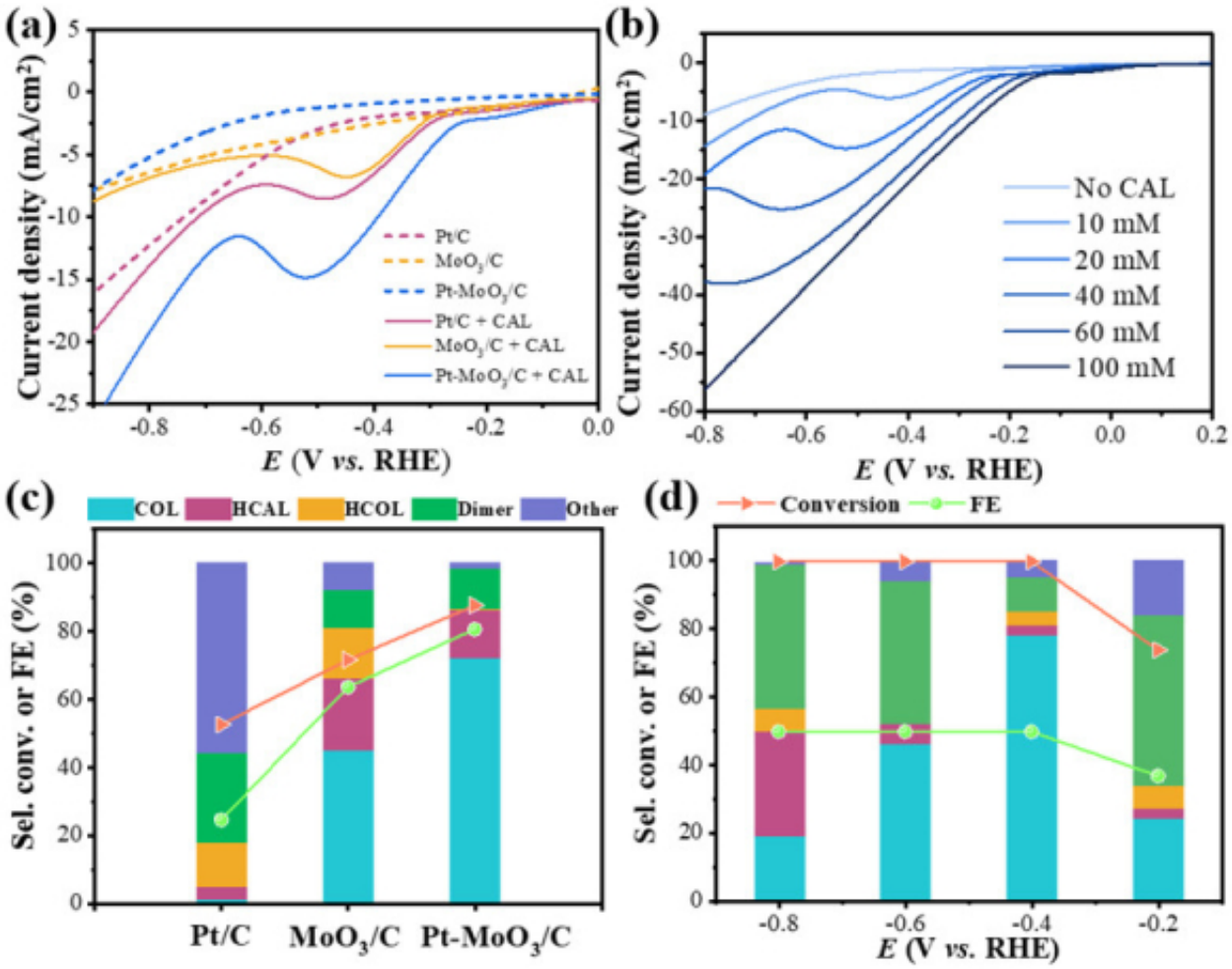



图2 （a）不同催化剂的LSV曲线；（b）不同反应物浓度的LSV曲线；（c-d）不同催化剂、电位对转化率、法拉第效率及产物选择性的影响

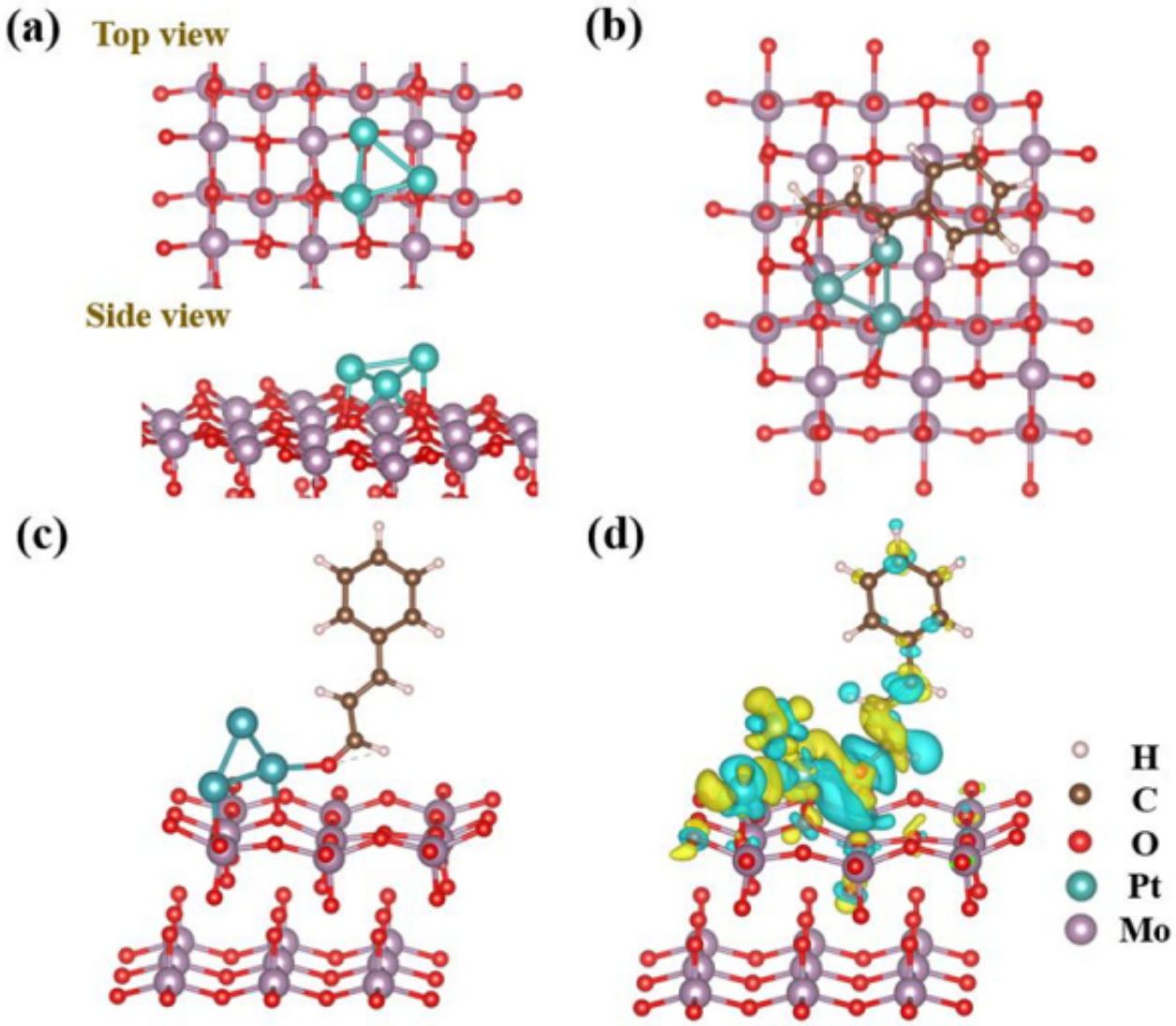



图3
（a）DFT计算模型Pt3-$MoO_3$（002）；（b）肉桂醛平行吸附构型；（c）肉桂醛垂直吸附构型；（d）电荷密度差图

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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