
研究揭示二氧化碳加氢制甲醇催化机理

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/23611.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！

研究揭示二氧化碳加氢制甲醇催化机理。

利用太阳能等可再生能源，通过光催化、光电催化或电催化分解水制氢耦合二氧化碳加氢制甲醇等燃料或化学品，是实现碳中和目标的有效策略，也是人工光合成的重要路径之一。近日，中国科学院大连化学物理研究所李灿院士、冯兆池研究员团队在二氧化碳加氢制甲醇的机理研究方面取得了新进展。团队利用operandoIR-MS技术，揭示了在ZnZrO_x固溶体催化剂上，相邻的Zn-O-Zr不对称活性中心对于二氧化碳活化和催化加氢的协同促进机理。相关成果发表在《美国化学会志》上。

二氧化碳加氢制甲醇催化机理示意图。大连化物所供图

目前，二氧化碳加氢制甲醇过程中，产物的选择性调控和催化剂稳定性是制约甲醇高效制备的关键因素。针对该问题，李灿团队前期研发了一系列双金属氧化物固溶体催化剂。其中，以ZnZrO_x催化剂为代表，该类催化剂可以同时实现甲醇合成的高选择性和高稳定性。并且对于该催化剂的改性和掺杂可进一步提高反应的催化性能。目前，固溶体催化剂已被国内外研究者广泛应用于二氧化碳转化制甲醇及其他二氧化碳加氢转化反应。尽管如此，氢气和二氧化碳在固溶体催化剂表面的吸附活化及吸附物种，如何才能加氢转化为甲醇的微观机理等仍不甚清楚。

本工作利用operando技术和理论计算方法，同时对表面反应过程和催化剂性能进行跟踪。结果表明，ZnZrO_x催化剂上Zn-O-Zr不对称活性中心对于碳酸盐和甲酸盐中间物种的形成和转化都起到了活化和促进作用。在反应起始阶段，二氧化碳主要以双齿构型的碳酸盐物种在表面吸附，氢气则以异裂解离的形式活化，容易形成C-H键，耦合等摩尔量的质子转移产生甲醇。

在整个反应过程中，催化剂表面的Zn-O-Zr不对称位点表现出了原子水平的协同作用，因此发现了这类相邻异质的不对称活性中心是催化甲醇高性能合成的本质原因。(来源：中国科学报 孙丹宁)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.3c02248>

作者：李灿等 来源：《美国化学会志》

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](https://www.iikx.com)转发