

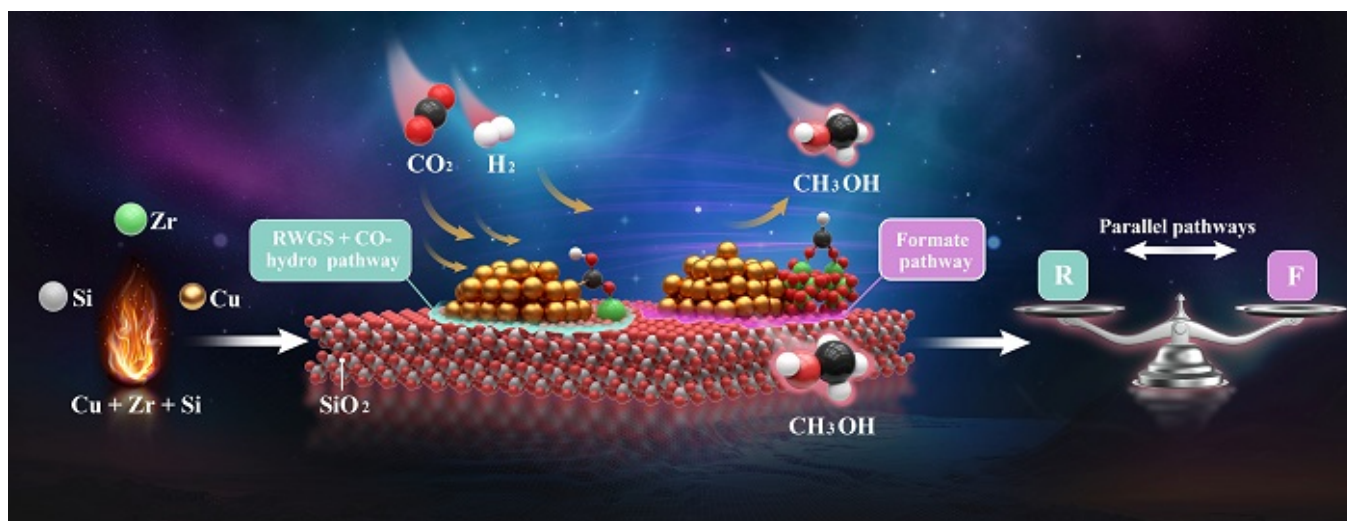
# 单位点锆物种在二氧化碳催化加氢中发挥作用

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25691.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！

单位点锆物种在二氧化碳催化加氢中发挥作用。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员孙剑、副研究员俞佳枫团队与德国卡尔斯鲁厄理工学院Anna Zimina博士等合作，利用火焰喷射裂解法构建了锚定在SiO<sub>2</sub>上的单位点Zr物种，该Cu/Zr-SiO<sub>2</sub>催化剂在二氧化碳加氢制甲醇反应中遵循RWGS-CO hydro路径，与传统的ZrO<sub>2</sub>纳米颗粒上的甲酸盐路径并行存在，打破了单一反应路径上的动力学限制，所形成的双通道反应路径是高效合成甲醇的关键。相关成果发表在《德国应用化学》上，并被选为热点论文和内封面论文。



该反应示意图。大连化物所供图

二氧化碳加氢制甲醇是一种十分具有应用前景的碳中和技术。Cu基催化剂是该领域公认的高效催化体系，但是Cu本身活性弱，其性能强烈依赖于载体的性质和作用。通常在ZrO<sub>2</sub>载体上，二氧化碳加氢反应遵循甲酸盐路径，这种单一反应路径在动力学上受中间物种吸脱附性能的限制，转化效率较低。因此，调控Cu与载体的界面效应和二氧化碳的活化方式对提升催化性能具有重要意义。

孙剑团队在前期火焰喷射法制备多种高效催化剂策略的基础上，制备了不同Zr含量的Cu/Zr-SiO<sub>2</sub>催化剂。其高温淬火特性增强了载体中Zr-Si组分间的相互作用，构筑了锚定在SiO<sub>2</sub>中的单位点Zr物种。原位红外漫反射表征和理论计算证明，单位点Zr和Cu的活性界面上能够形成Cu-C-O-Zr配位的羧酸盐中间体，遵循RWGS-CO hydro路径合成甲醇；而在ZrO<sub>2</sub>纳米颗粒上二氧化碳活化生成Zr-O-C-O-Zr配位的甲酸盐（HCOO\*）中间体，遵循甲酸盐路径合成甲醇，二者可在不

---

同的活性位点上平行进行。该双通道路径在合成甲醇中的占比可通过Zr含量进行优化，当两种路径贡献几乎均等时，体系的反应性能最优。

此项工作通过增强载体中Zr-Si组分间的相互作用，构筑了SiO<sub>2</sub>稳定的单位点Zr物种，提出了Cu-Zr<sub>1</sub>活性界面的催化反应机制，打破了传统的单一反应路径的限制，解锁了双通道路径合成甲醇的新策略，为单分散氧化物催化剂的合理设计和应用提供了依据。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.202312292>

作者：孙剑等 来源：《德国应用化学》

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