二氧化碳加氢催化剂研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/38691.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！

将二氧化碳（CO_2）转化为甲醇、二甲醚等高值化学品的过程面临氢分子在氧化物催化剂上的活化效率极低核心瓶颈，成为制约反应速率的关键技术问题。

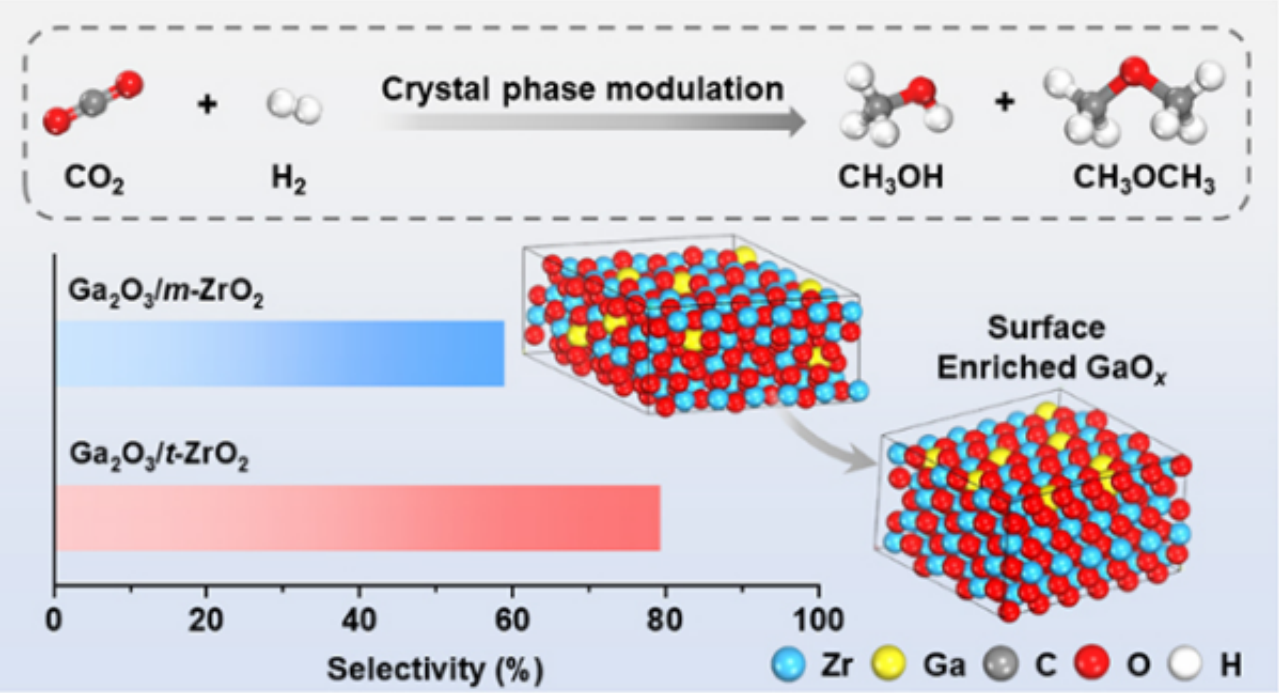
近日，中国科学院兰州化学物理研究所等在CO_2加氢催化领域取得重要突破。团队首次提出“晶相限域表面富集”概念，揭示了载体晶相对活性位点空间分布的精准调控机制，为高性能催化剂的理性设计提供了全新范式。

团队以GaO_x/ZrO_2为模型催化剂，通过系统研究发现ZrO_2载体的晶相精准调控GaO_x活性物种的分布。研究揭示了Ga原子掺入*t*-ZrO_2体相，需克服4.56 eV的能量壁垒，从本质上解释了为何*t*-ZrO_2能“锁定”活性物种于表面。*t*-ZrO_2上氧空位形成能更低，更易与Ga协同生成高活性的Ga – OV – Zr界面位点。

团队发现，在GTZ-10催化剂（Ga_2O_3/*t*-ZrO_2）表面甲酸盐能被高效稳定并快速转化，而GMZ-10表面则出现甲酸盐“积压”现象，转化速率缓慢。DFT计算进一步证实，甲酸盐路径的初始步能垒比羧酸盐路径低100 $kJ \cdot mol^{-1}$以上，热力学优势显著。

相关研究成果发表在《美国化学会-催化》（*ACS Catalysis*）上。研究工作得到国家自然科学基金、甘肃省自然科学基金等的支持。

论文链接



二氧化碳加氢催化剂研究取得进展

研究团队单位：兰州化学物理研究所

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