氨分解制绿氢催化剂研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/39792.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！

氨分解制绿氢催化剂研究获进展
。氢能作为零碳高效二次能源，具有广阔应用前景。Ru基催化剂凭借其独特的几何构型和电子性质，在氨分解制氢领域展现出突出的催化优势。

近日，中国科学院兰州化学物理研究所创新性地在TS-1分子筛骨架中原位构筑Ti空位，精准调控Ru物种的几何和电子结构，为Ru基催化剂设计提供新策略。

表征结果表明，TS分子筛中Ti空位的构筑可调控Ru纳米颗粒的几何构型，提高其分散度和B5位点浓度。更重要的是，Ti空位可增强TS分子筛与Ru物种之间的金属-载体相互作用，优化Ru与TS分子筛之间的电子转移，调控Ru位点的电子结构，并诱导形成更多高活性Ru^{0}-O_{v}-Ti^{3+}界面。

原位DRIFTS结果揭示，Ru/*d*
20-TS催化剂上Ti-OH的消耗-
再生循环机制，Ti-OH位点作为NH_3吸附位点被消耗，Ru位点是活化NHx中间体，诱导N-H键断裂的主要活性位点，Ti^{3+}位点作为质子H*受体可诱导催化剂表面Ti-OH的再生，共同建立高效的NH_3
分解催化循环。DFT计算进一步揭示了Ru^{0}-O_{v}-Ti^{3+}
结构的内在电子性质及其在NH_3分解各基元反应中的热力学优势。

该工作为未来理性设计高性能NH_3分解催化剂提供了重要理论基础。

相关研究成果发表在《先进功能材料》（*Advanced Functional Materials*
）上。研究工作得到甘肃省联合科研基金重点项目、兰州市人才创新创业项目等的支持。

论文链接

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