

---

# 三氧化二铟催化二氧化碳加氢制甲醇反应机理研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40196.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！*

三氧化二铟催化二氧化碳加氢制甲醇反应机理研究获进展。二氧化碳（ $\text{CO}_2$ ）催化加氢制甲醇是实现 $\text{CO}_2$ 资源化利用的重要途径。三氧化二铟（ $\text{In}_2\text{O}_3$ ）甲醇选择性高，被视为极具潜力的 $\text{CO}_2$ 加氢催化剂之一。然而，其表面真实活性位点的种类与功能，尤其是氧空位与表面羟基的协同作用，仍存在争议，核心在于传统表征手段难以直接区分不同表面氧物种，且 $\text{In}_2\text{O}_3$ 的催化温度通常较高（ $250^\circ\text{C}$ 以上），其高温原因尚不明确。

近日，中国科学院大连化学物理研究所研究团队在 $\text{In}_2\text{O}_3$ 催化 $\text{CO}_2$ 加氢制甲醇反应机理研究方面取得进展。

针对活性位结构解析与温度响应构效关系的研究需求，团队发展了一种基于高效 $^{17}\text{O}$ 同位素富集与高场固体核磁共振（NMR）结合的新策略，在18.8T高场条件下实现了 $\text{In}_2\text{O}_3$ 表面氧物种的高分辨识别。研究实现了对三类关键氧物种，即表面三配位氧（ $\text{OIn}_3$ ）、体相四配位氧、不同类型的表面羟基的高分辨识别与定量表征。其中，表面 $\text{OIn}_3$ 被明确识别为氧空位形成的直接前驱体；变温实验进一步表明， $\text{OIn}_3$ 转变至氧空位的温度在 $200^\circ\text{C}$ 以上。

在此基础上，团队结合 $^{17}\text{O}$ - $\text{In}_2\text{O}_3$ 与 $^{13}\text{CO}_2/\text{H}_2$ 双同位素富集技术，追踪了 $\text{In}_2\text{O}_3$ 表面物种与 $\text{CO}_2$ 活化、 $\text{H}_2$ 活化等关键加氢步骤的构效关系，通过 $^{17}\text{O}$  NMR观察到 $\text{CO}_2$ 分子与 $\text{In}_2\text{O}_3$ 的氧原子发生化学交换，并结合 $^{13}\text{C}$  NMR证实几乎所有表面氧物种（包括铟羟基）均参与 $\text{CO}_2$

吸附与活化。外原位反应表征揭示，在氧空位存在时，甲酸盐生成条件较为温和，室温下即大量生成，但进一步加氢生成甲醇/甲氧基需要较高温（ $> 200\text{ }^{\circ}\text{C}$ ）。

该研究明确了 $\text{In}_2\text{O}_3$

加氢制甲醇的两处关键温度

阈值：氧空位产生温度、甲酸盐制甲醇和甲氧基转化温度，为构建低温 $\text{In}_2\text{O}_3$ 催化体系

提供设计思路。同

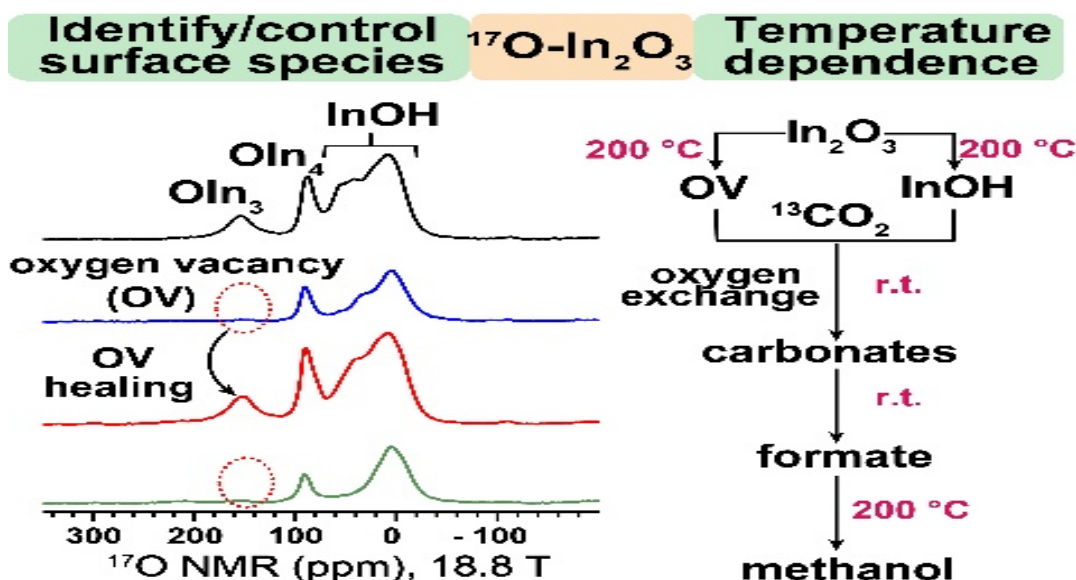
时，研究建立的可直接追踪氧空位生

成、演化及反应行为的 $^{17}\text{O}$ 固体NMR

新方法，为理解金属氧化物催化剂表面动态结构演化提供了新的实验手段。

相关研究成果发表在《德国应用化学》（Angewandte Chemie International Edition）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会等的支持。

[论文链接](#)



科研团队利用固体NMR技术揭示 $\text{In}_2\text{O}_3$ 催化 $\text{CO}_2$ 加氢的表面活性位物种演化及温度构效关系

研究团队单位：大连化学物理研究所

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](http://iikx.com)转发