

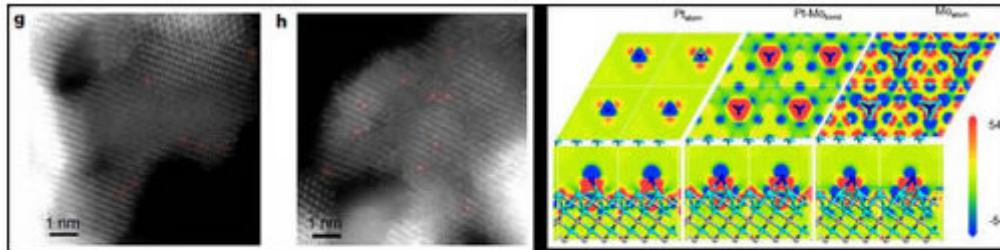
## 科学家实现含碳资源到无碳能源的高效温和转化

当前乃至30-50年内经济和社会的发展仍以碳基为主的能源消费结构为基础，而该能源结构导致的环境污染和生态文明建设之间的矛盾愈发凸显，实现含碳资源高效清洁转化利用是当前解决这些矛盾的重要途径之一。而未来，人类将面向以低碳与无碳能源经济为基础的可持续能源结构，特别是以氢能为主的能源体系新结构。其中氢燃料电池是最具潜力的新一代能量提供系统，但是氢气化学性质活泼，氢气的存储和运输一直以来是阻碍氢能源大规模应用的瓶颈。目前，虽然丰田实现了氢燃料电池汽车的示范，而氢气储存在约120L、压力高达700公斤的钢瓶中，其安全性不容乐观，并且城市内加氢基础设施建设亦存在一定隐患。此外，目前其他的氢气储放体系，或价格昂贵，或存储容量有限。针对这些不足，将氢气存储在甲醇中成为了科研人员所感兴趣的解决途径，甲醇能够和水进行液相重整并原位释放高质量密度（18.8wt%）的氢气。但传统的甲醇蒸汽重整操作需要在相对较高的温度（200~350 oC）下进行，为实现高效并在温和条件下制氢，突破氢气的存储和运输瓶颈，亟待开发新型甲醇水重整高效催化体系。

最近，中国科学院山西煤炭化学研究所煤转化国家重点实验室温晓东（中组部青年千人，中科院百人）课题组与北京大学化学与分子工程学院马丁、中国科学院大学周武，以及大连理工大学石川等课题组合作，针对甲醇和水液相制氢反应的特点，从实验设计出发，结合理论计算开发出新型原子级分散的铂-碳化钼双功能催化剂，实现了在低温下（150~190 oC）高效的产氢效率。研究发现金属铂（Pt）与碳化钼（MoC）基底之间存在着非常强的相互作用，使得Pt以原子级分散在MoC纳米颗粒表面，构筑出高密度的原子尺度催化活性中心。单分散Pt主要负责甲醇的解离过程，而MoC主要负责水的解离过程，重要的是这两个催化过程的反应速率相近，进而形成了高效的双功能催化体系。

原子级高度分散的Pt中心和碳化钼基底之间的协同作用能够在两者界面实现对反应中间体的高效活化和协同转化，从而使得整个催化剂在甲醇和水液相反应中表现出超高的产氢活性，在150oC就能以2,276 molH<sub>2</sub>/(molPt\*h)的反应速率释放氢气，进一步提高温度至190oC，放氢速率可达18,046 molH<sub>2</sub>/(molPt\*h)，较传统铂基催化剂活性提升了近两个数量级。同时，原子级分散的特点能最大限度地提高贵金属铂的利用率，以产氢活性估计，仅需含有6克铂的该催化剂即可使产氢速率达到1 kgH<sub>2</sub>/h，基本满足商用车载燃料电池组的需求。以目前甲醇市场价格（2400元/吨）计算，采用此技术路径储放氢气，氢燃料电池汽车每百公里燃料价格仅需约13元，而加60~80升甲醇可供家用小轿车行驶600~1000公里。该研究工作为含碳资源高效清洁转化利用提供了新的方向，实现了从含碳资源到无碳能源的高效温和转化，为氢能制备、存储及安全利用提供了新的思路，并有望作为下一代高效储放氢新体系得到应用。该研究成果以Low-temperature hydrogen production from water and methanol using Pt/ -MoC catalysts为题发表于3月23日的《自然》（Nature, doi: 10.1038/nature21672）上。美国化学会C&E News杂志以《氢能源：制备氢燃料新过程》（New process for generating hydrogen fuel）为题对该工作进行了亮点报道。特拉华大学能源中心主任Dion Vlachos评论这个新过程“在反应性能上处在技术前沿”；而德国莱布尼兹催化所所长Matthias Beller认为这个催化体系是一个重大突破。此类催化剂还有望在其他水相重整制氢过程，如在生活废水、乙醇等原料的催化产氢中发挥优势作用。

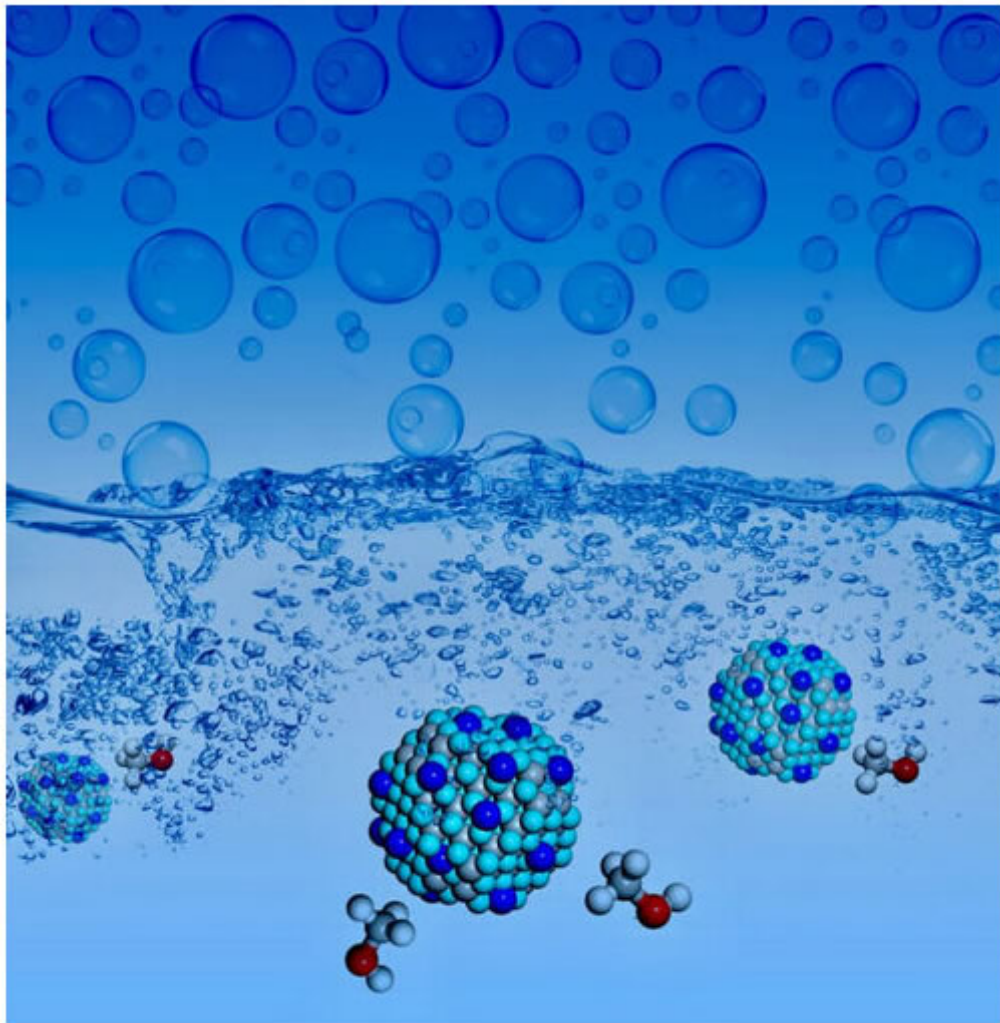
该文第一作者是北京大学林丽利、国科大研究员周武和中科院山西煤化所煤转化国家重点实验室/中科合成油博士高瑞。该研究得到中组部国家青年千人计划、国家自然科学基金（重大研究计划-碳基能源转化利用的催化科学）、中科院百人计划、山西省百人计划等项目资助。



**Table 2 | Effective energy barriers and reactive sites for water dissociation and methanol decomposition on various catalysts**

Catalyst	$\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}$		$\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CO} + 4\text{H}$		Water-gas shift reaction		Rate constant ratio ( $k_{\text{H}_2\text{O}}/k_{\text{CH}_3\text{OH}}$ ) <sup>a</sup>
	$E_a$ (eV)	Site	$E_a$ (eV)	Site	$E_a$ (eV)	Site	
MoC	0.56	MoC	1.30	MoC	1.87	No	$6.56 \times 10^8$
Pt(111)	1.15	Pt	0.79	Pt	1.18	No	$5.13 \times 10^{-5}$
Pt <sub>1</sub> /MoC	0.56	MoC	0.67	Interface	0.91	Interface	20.44

单分散Pt与MoC载体间的双功能甲醇水重整制氢催化剂的设计



基于原子级分散Pt-MoC催化体系的甲醇和水液相高效温和条件制氢示意图

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/106387.html>