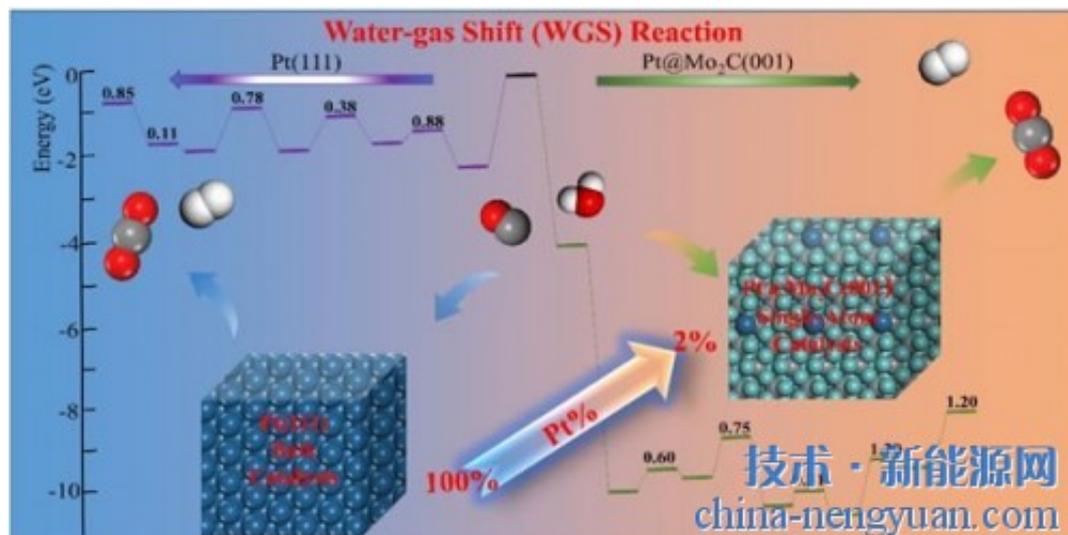


福建物构所等经济稳定产氢单原子催化剂理论设计研究获进展



清洁能源是人类社会可持续发展的基石，而氢是一种最为理想的清洁能源之一。水煤气反应是一种重要的产氢方式，但是关键的催化剂及其催化机理还缺乏深入的探究。

中国科学院福建物质结构研究所结构化学重点实验室吴克琛研究组在副研究员李巧红主持的国家基金委青年项目和美国怀俄明大学化学系教授范茂宏主持的美国能源部项目等的资助下，积极开展面向新能源催化反应机理和新型催化剂的理论研究。近日，李巧红与范茂宏开展合作，以贵金属铂的高效应用于水煤气反应为研究背景，通过严密的理论计算设计出一款稳定且低价高效产氢的新型负载型单原子Pt基催化剂——Pt@Mo₂C。该单原子催化剂能够最大程度地提高贵金属Pt的原子利用率，为实用产氢材料的设计和应用提供了重要的理论基础。研究结果显示过渡金属Pt与载体上的Mo原子具有较强的相互作用，水煤气反应中吸附物种最稳定的吸附位点都在Mo位点上；中间体trans-COOH是Pt@Mo₂C催化剂表面上最主要的物种，而HCOO不是一个活跃的反应中间体；研究创新性地发现Mo和Pt-Mo位点是水煤气反应的活性位点：Mo位点有利于水解离的发生并释放出大量氢；同时Pt-Mo位点有利于H-H键的形成，通过双金属界面的协同作用，从而有效提高了Pt@Mo₂C催化剂产氢能力。相关联合研究已发表于材料工程刊物《材料化学A刊》（*J. Mater. Chem. A*, 2017, DOI:10.1039/C7TA03115G）。

此前该研究组还在以获得清洁能源为目标的光催化分解水产氢的半导体材料能带调控的理论工作中取得进展（*J. Mater. Chem. A* 2015, 3, 8466）。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/111778.html>