

科学家提出金属-碳化钼体系“选择性部分重整”制氢新技术

近年来，生物乙醇因可再生性、高含氢量及良好的储运安全性，成为备受关注的绿色制氢原料。而传统的乙醇-水重整制氢技术存在两大难题。一是该过程通常需在400至600的高温条件下进行，能耗高且难以避免乙醇分子C-C键断裂导致的CO₂排放；二是现有催化剂易受到积碳和烧结失活的影响，限制其工业化应用，难以兼顾催化效率和长期稳定性。

中国科学院大学教授周武课题组联合北京大学教授马丁课题组、北京大学研究员周继寒课题组、英国卡迪夫大学教授Graham J. Hutchings，基于周武课题组与马丁课题组在金属-碳化钼（M/ α -MoC）催化剂体系近十年的合作研究成果，开创性地提出了金属-碳化钼体系“选择性部分重整”制氢新技术。这一技术通过原子级精准设计、调控铂/铱（Pt/Ir）双金属- α -MoC界面，将乙醇-

水重整反应从传统的完全重整（氧化）路径转变为选择性部分重整路径（ $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{H}_2 + \text{CH}_3\text{COOH}$ ），在270℃温和条件下实现高通量氢气制备，同时联产高值化学品（乙酸）。

这一过程从反应源头消除了CO₂直接排放，并将反应物中的碳资源高选择性地转化为液态化学品。该成果为氢能产业的碳中和转型提供了新范式，并为生物质资源“氢气-

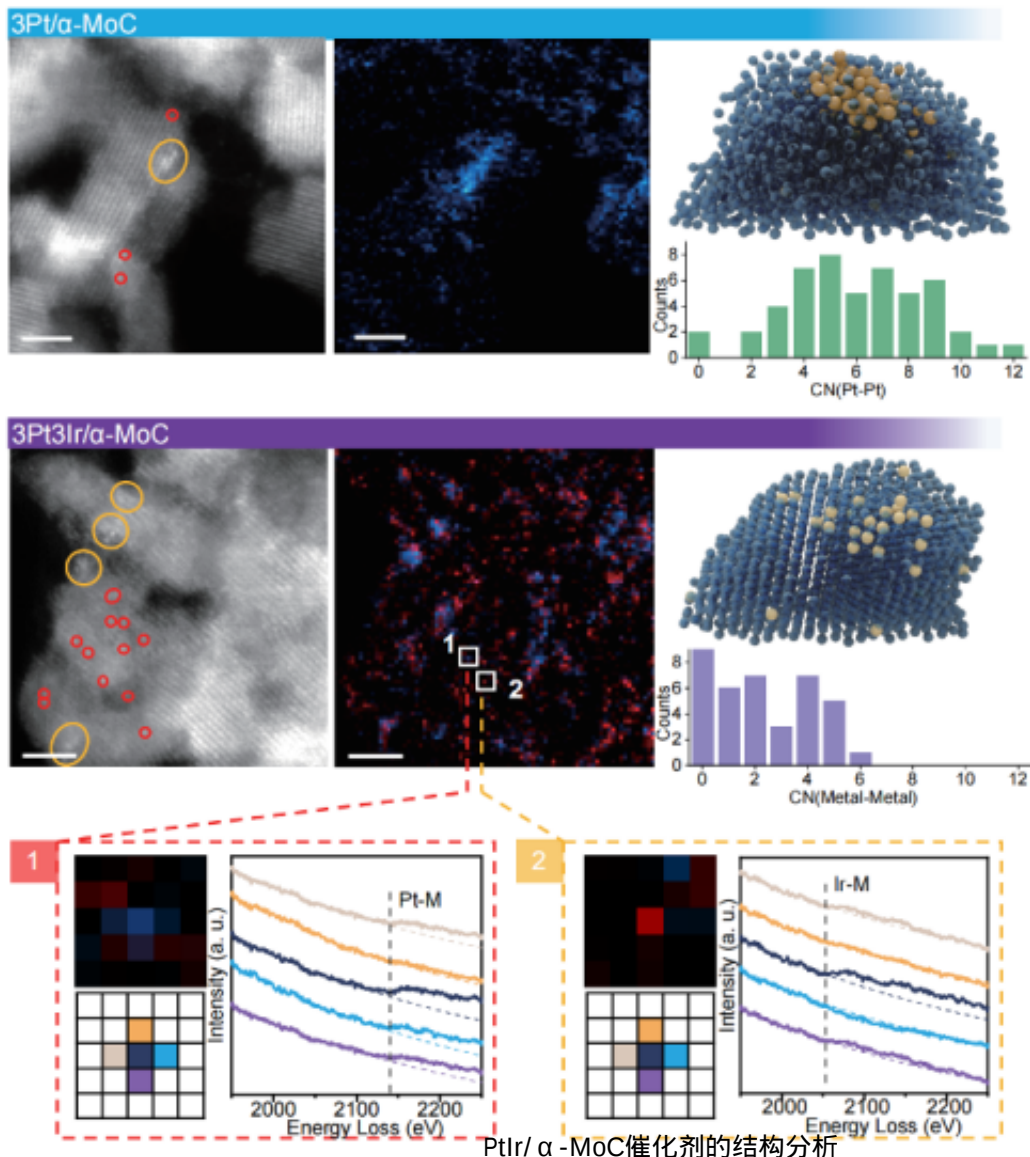
化学品联产”的循环经济模式奠定了重要基础。2月14日，相关研究成果以Thermal catalytic reforming for hydrogen production with zero CO₂ emission为题，发表在《科学》（Science）上。

新型铂-铱双金属催化剂（PtIr/ α -MoC）的核心创新在于原子尺度的界面工程设计。单原子分辨的低压扫描透射电镜（STEM）电子能量损失谱（EELS）成像分析表明，在3wt%负载的3Pt/ α -MoC催化剂中，Pt物种主要以单原子和团簇的形式存在于MoC表面，其中Pt团簇的尺寸约为1nm。而在催化剂中引入相近载量的Ir物种后，3Pt3Ir/ α -MoC催化剂中Pt物种的分散性得到显著提升，同时Ir主要以高分散的单原子形式存在。这些发现源于原子级分散的Pt和Ir物种与 α -MoC载体之间不同程度的强相互作用。其中，Ir优先在载体表面落位，促进Pt的分散并约束Pt颗粒的生成，进而构建高密度的界面催化活性位点，避免贵金属颗粒的形成，抑制催化过程中C-C键的断裂。这一设计确保催化剂能够在温和条件下高效活化乙醇-水体系并保持长期稳定性。

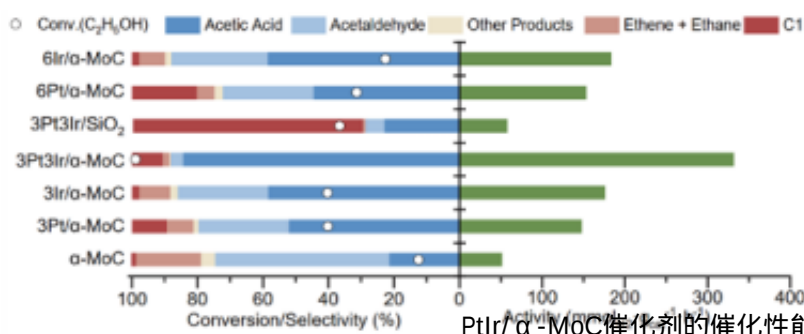
催化性能评价显示，该催化剂在270℃条件下，氢气产率达331.3毫摩尔每克催化剂每小时，乙酸选择性达84.5%，且在长达100小时的稳定性测试中表现出优异的抗失活能力。相比于传统乙醇-水重整反应，这一新技术能耗更低、更加环保，并提供了绿色制备乙酸的新路径。

在该研究中，周武课题组首次利用单原子分辨的低压STEM-EELS成像技术，实现了对催化剂上周期表中相邻贵金属物种的原子级化学成像，揭示了载体上单原子Ir物种对Pt物种分散度的促进作用。与常规STEM-HAADF原子序数衬度分析相比，这一技术在多元素混合的复杂体系中展现出优势，能够更精准地解析双金属催化剂体系，甚至更复杂的催化剂体系中负载金属之间以及负载金属-载体之间的强相互作用。该技术为探讨催化剂活性提升机制提供了直接的结构证据，对高效催化剂体系的设计和优化具有重要意义。

研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、中国科学院稳定支持基础研究领域青年团队计划等的支持。



PtIr/α-MoC催化剂的结构分析



PtIr/α-MoC催化剂的催化性能

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/221044.html>