

科大要闻 人才培养 媒体关注 校园文化 科大人 招生在线 科教视点
电子杂志 科研进展 学术讲堂 院系动态 视频新闻 新闻专题 中国科大报

首页

首页 新闻博览

[中科院量子信息与量子科技创新研究院理事会会议暨2018年度工作会议在合肥召开](#)

[我校量子信息成果“入选”习近平主席2018年新年贺词](#)

[两项量子信息成果同时入选2017年度中国十大科技进展新闻](#)

[我校第九届教代会第四次会议开幕](#)

[中国科大百人会与中国科大战略合作框架协议签约暨捐赠仪式举行](#)

[“墨子号”量子卫星成功实现洲际量子密钥分发](#)

[我校16人入选第三批国家“万人计划”](#)

[我校印娟副研究员获上海市巾帼创新新秀奖](#)

[凝聚相超快光谱研究取得新进展：揭示光激发反向空穴转移动力学行为机制](#)

[我校团员青年热切关注全国“两会”](#)

[机关党委召开会议 研究2018年主要工作](#)

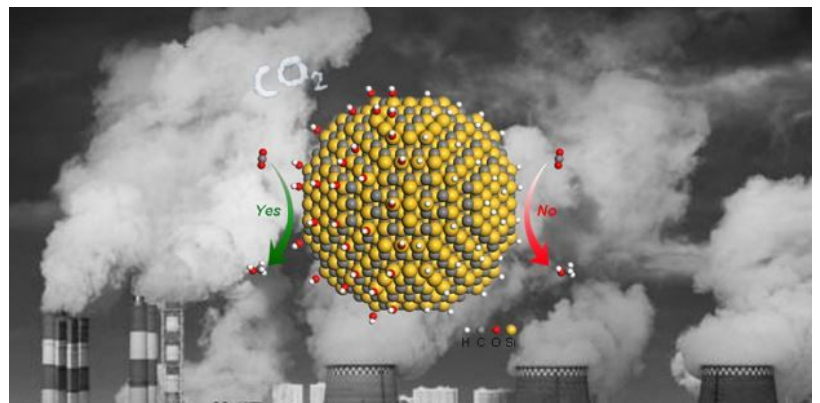
[中国科学院](#)
[中国科学技术大学](#)
[中国科大历史文化网](#)
[中国科大新闻中心](#)
[中国科大新浪微博](#)
[瀚海星云](#)
[科大校友创新基金会](#)
[中国高校传媒联盟](#)
[全院办校专题网站](#)
[中国科大60周年校庆](#)
[中国科大邮箱](#)

从原子尺度上揭示亲疏水性对二氧化碳加氢反应的作用机制

2

分享到： [QQ空间](#) [新浪微博](#) [腾讯微博](#) [人人网](#)

近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心和化学与材料科学学院课题组以碳化硅体系为研究对象，发现亲疏水性在催化反应过程中起到了至关重要的作用。从原子尺度上解释了这种作用的“来源”：亲水性的碳化硅量子点表面富含羟基结构，可促进二氧化碳分子的活化。该成果以“Molecular-Level Insight into How Hydroxyl Groups Boost Catalytic Activity in CO₂ Hydrogenation”，2月22日在线发表在《Chem》杂志上（Chem 2018, DOI: 10.1016/j.chempr.2018.01.019），论文的共同第一作者是博士生王梁炳和特任副研究员罗其全。



SiC催化CO₂加氢反应示意图

催化反应是在催化剂表面发生的，通常我们可以调控催化剂表面的性质来提升催化活性、选择性和稳定性。亲疏水性是一个重要的表面性质参数，过去人们对于亲疏水性质的理解都停留在对底物分子的富集作用上，例如亲水的催化剂表面容易吸附醇类等物种，而疏水的表面容易吸附酯类酮类等物种。但这种理解是比较宏观的，所以从原子尺度上揭示催化剂亲疏水性影响催化反应的本质，对于设计高效催化剂具有重要指导意义。

研究人员对比了商用碳化硅和量子点碳化硅二氧化碳加氢反应活性，发现亲水性的量子点碳化硅在32 atm和150 °C的条件下，质量活性（mass activity）比同等条件下疏水性的商用碳化硅高出三个数量级。量子点碳化硅的表观活化能是（48.6 kJ mol⁻¹），只有商用碳化硅（94.7 kJ mol⁻¹）的一半左右。借助原位同步辐射X射线光电子能谱和近边X射线吸收谱段，研究人员发现亲水性的量子点碳化硅表面富含羟基，羟基上的H原子可以直接与二氧化碳作用形成HCOO*中间物种，从而直接参与到催化反应过程中。这种特殊的反应路径降低HCOO*形成的活化能，从而促进了二氧化碳的活化。基于该认识，研究人员还构筑了一类富含羟基的催化剂，这些催化剂在CO₂加氢反应中的活性比其不含羟基的结构高出了一

级。该课题组对亲疏水性在CO₂加氢反应中的作用的理解，突破了人们对于亲疏水性的认知，为今后寻找更为高效的CO₂加氢催化剂开拓了新的思路。

该项研究得到了中科院前沿科学重点研究项目、国家重大科学研究计划、国家自然科学基金等项目的资助。

(合肥微尺度物质科学国家研究中心、化学与材料科学学院、科研部)

中国科大新闻网



中国科大官方微博



中国科大官方微信



Copyright 2007 - 2008 All Rights Reserved 中国科学技术大学 版权所有 Email : news@ustc.edu.cn

主办：中国科学技术大学 承办：新闻中心 技术支持：网络信息中心

地址：安徽省合肥市金寨路96号 邮编：230026