

[收藏本站](#)[设为首页](#)[English](#) [联系我们](#) [网站地图](#) [邮箱](#) [旧版回顾](#)

面向世界科技前沿，面向国家重大需求，面向国民经济主战场，率先实现科学技术跨越发展，  
率先建成国家创新人才高地，率先建成国家高水平科技智库，率先建设国际一流科研机构。

[中国科学院办院方针](#)[首页](#) [组织机构](#) [科学研究](#) [人才教育](#) [学部与院士](#) [资源条件](#) [科学普及](#) [党建与创新文化](#) [信息公开](#) [专题](#)[搜索](#)[首页 > 科研进展](#)

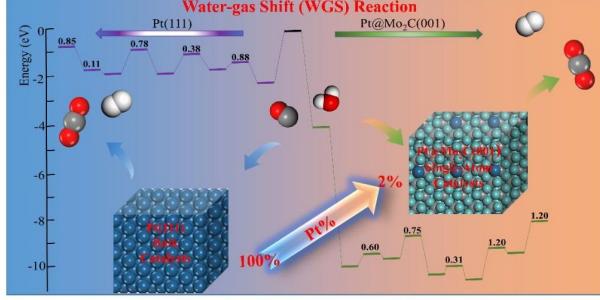
## 福建物构所等经济稳定产氢单原子催化剂理论设计研究获进展

文章来源：福建物质结构研究所 发布时间：2017-07-20 【字号：[小](#) [中](#) [大](#)】[我要分享](#)

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颖负载型单原子Pt基催化剂——Pt@Mo<sub>2</sub>C。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-COO是Pt@Mo<sub>2</sub>C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II-II键的形成，通过双金属界面的协同作用，从而有效提高了Pt@Mo<sub>2</sub>C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)。



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

(责任编辑：叶瑞优)



© 1996 - 2018 中国科学院 版权所有 京ICP备05002857号 京公网安备110402500047号 联系我们

地址：北京市三里河路52号 邮编：100864

### 热点新闻

中科院党组重温习近平总书记重...

中科院党组学习贯彻习近平总书记对中央...  
中科院召开巡视整改“回头看”工作部署会  
中科院2018年第2季度两类亮点工作筛选结...  
白春礼会见香港特别行政区行政长官林郑...  
中科院党组2018年夏季扩大会议召开

### 视频推荐



【新闻联播】“率先行动”  
计划领跑科技体制改革



【东方卫视】上海光源，给  
科学家一双慧眼

### 专题推荐

