

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 科研进展

## 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

分享到: QQ空间 新浪微博 腾讯微博 人人网

[世界首颗量子科学实验卫星“墨子号”在轨交付仪式在京举行](#)

[中国科大主导研制的全球首颗量子科学实验卫星“墨子号”成功发射](#)

[世界首颗量子科学实验卫星“墨子号”发射升空 白春礼院长致信祝贺...](#)

[中国科大提出在冷原子系统中模拟曲面量子霍尔效应的新方案](#)

[中国科大首次利用演化的特征谱观测非马尔可夫性](#)

[吴緬教授课题组在长非编码RNA维护基因组稳定研究中取得新成果](#)

[中国科大研制出新型隔热防火双网络复合气凝胶](#)

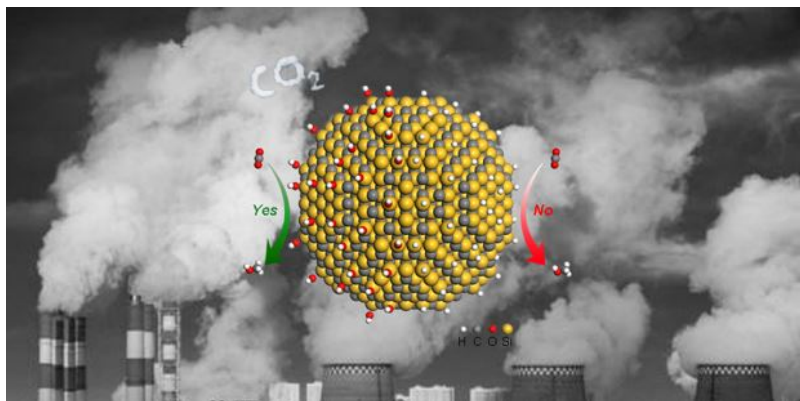
[中国科大在乙肝病毒导致肝癌的免疫逃逸机制研究中取得重要进展](#)

[中国科大在氧化物界面量子振荡起源研究方面取得重要进展](#)

[中国科大首次实现广义索利斯泵的实验观测](#)

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科学学院曾杰教授课题组以碳化硅体系为研究对象，发现亲疏水性在催化过程中起到了至关重要的作用，并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，可以有效促进二氧化碳分子活化。该成果以“Molecular-Level Insight into How Hydroxyl Groups Boost Catalytic Activity”为题，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彭钰涵、博士生王梁炳和特任副研究员罗其全。



SiC催化CO<sub>2</sub>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提升催化反应的活性、选择性和稳定性。亲疏水性是一个重要的表面性质，过去人们对于亲疏水性质的理解基本都停留在对底物分子的富集作用。例如亲水的催化剂表面容易吸附醇类等物种，而疏水性表面容易吸附酯类等物种。但这种理解是比较宏观的，所以从原子尺度上揭示催化剂表面性质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。亲水性的量子点碳化硅在32 atm和150 °C的条件下，质量活性

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

(mass activity) 比同等条件下疏水性的商用碳化硅高出三个数量级。碳化硅的表观活化能是 ( $48.6 \text{ kJ mol}^{-1}$ )，只有商用碳化硅 ( $94.7 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) 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射线吸收谱手段，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原子直接与二氧化碳相互作用形成 $\text{HCOO}^*$ 中间物种，从而直接参与到催化反应中。这种特殊的反应路径降低了 $\text{HCOO}^*$ 形成的活化能，从而促进了二氧化碳的加氢反应。基于该认识，研究人员还构筑了一系列表面富含羟基的催化剂，该催化剂在 $\text{CO}_2$ 加氢反应中的活性比其不含羟基的结构高出了一个数量级。该研究加深了人们对亲疏水性在 $\text{CO}_2$ 加氢反应中的作用的理论理解，突破了人们对于亲疏水性的传统认知，为今后寻找更为高效的 $\text{CO}_2$ 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

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](mailto: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