

[首页](#)[学校概况](#)[院所设置](#)[师资队伍](#)[书院生活](#)[教学培养](#)[科学研究](#)[国际合作](#)[党群园地](#)[招聘](#)[招生](#)[就业](#)[招标](#)[邮件](#)[Egate](#)[校历](#)[图书馆](#)[信息公开](#)[校园导览](#)[联系我](#)

## 物质学院杨波课题组提出镍基甲烷干重整催化剂理论设计的新策略

ON 2020-02-21

文章来源 物质科学与技术学院

CATEGORY 新闻

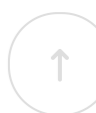
近日，我校物质学院杨波课题组在理论辅助甲烷干重整催化剂设计方面取得了重要进展。该工作以掺杂了少量锡的镍基催化剂为研究对象，从理论研究方面分析了锡对催化剂活性与稳定性的影响，并据此提炼出可用于筛选甲烷干重整反应催化剂的描述符，为筛选与设计具有兼具高反应活性与高稳定性的催化剂提供了新方向。该成果以“Descriptor Design in the Computational Screening of Ni-Based Catalysts with Balanced Activity and Stability for Dry Reforming of Methane Reaction”为题发表在国际知名学术期刊*ACS Catalysis*。

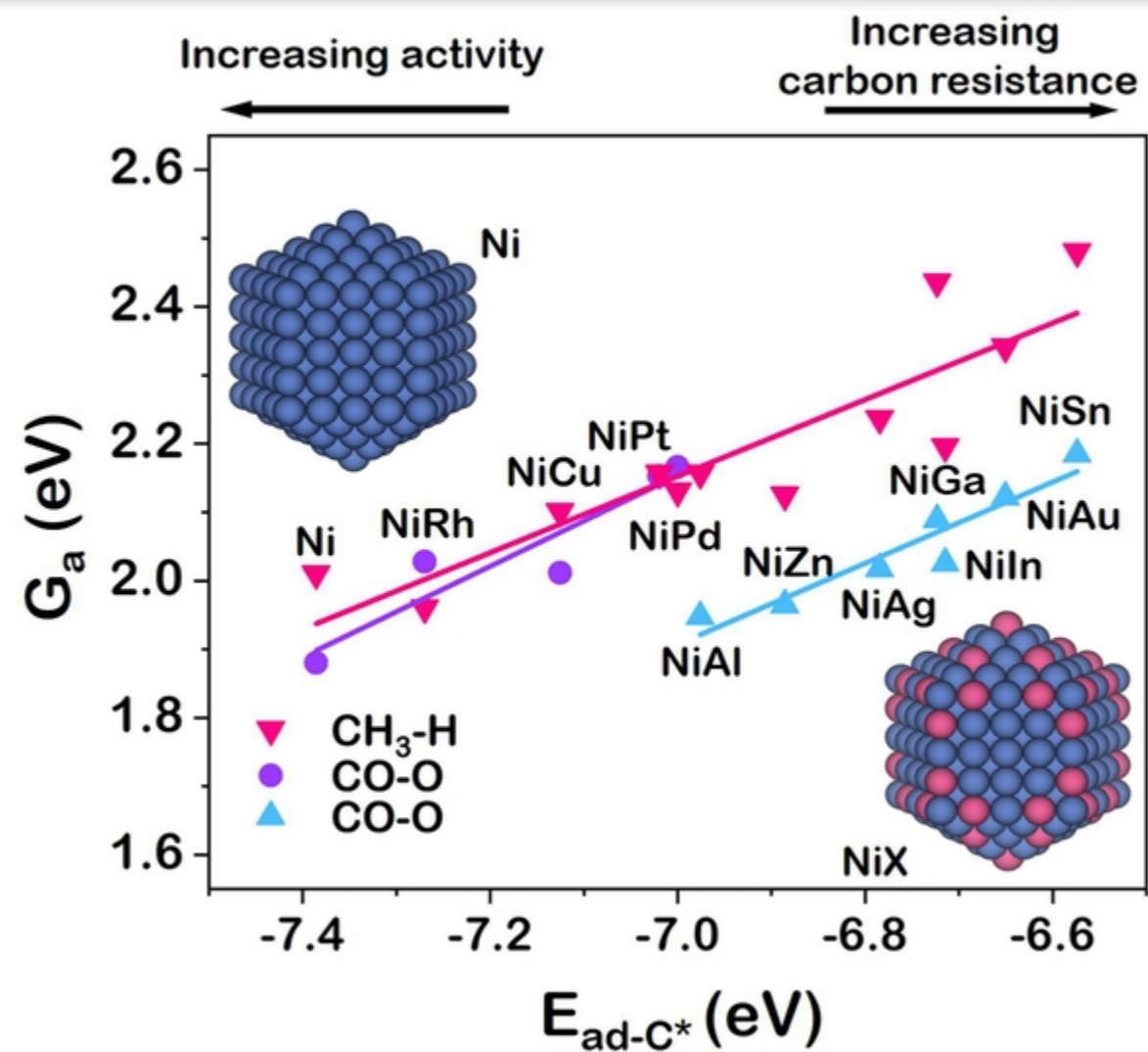
甲烷干重整反应，因其以重要温室气体甲烷与二氧化碳为反应物，且产物为可进一步利用的合成气而受到广泛关注。镍催化剂由于反应活性较高，储量丰富、价格低廉而被认为可代替贵金属催化剂用于催化该反应。然而镍催化剂在甲烷干重整反应条件下普遍会由于产生积碳而失活，研究中通常采用助剂掺杂的方法对催化剂进行改性。由于当前对助剂如何影响催化剂的稳定性与活性欠缺深层次理解，获得兼具高稳定性与高活性的催化剂仍是研究中的一大挑战。

该工作首先选取了实验中已报道的少量锡掺杂的镍这一能够有效抑制积碳的催化剂为对象，利用密度泛函理论结合微观动力学模拟的方法，深入研究了锡对催化剂活性与稳定性的影响。研究发现，由于掺杂的锡减弱了催化剂表面碳的吸附，同时升高了甲烷解离的能垒，使得高温下的速控步骤从纯镍上的二氧化碳解离变化为甲烷解离，导致了反应活性和表面积碳程度的降低。在此基础上，该工作发展了新的分析方法，提出当催化剂表面碳生成过程为速控过程时，催化剂的抗积碳性将得到极大提高，并据此总结出了表面碳吸附能以及甲烷与二氧化碳解离自由能垒作为快速判断催化剂活性与稳定性的描述符。最后，使用以上描述符对不同金属掺杂的镍基催化剂进行筛选，其结果能够很好地解释已有实验报道，并且指出了铝与锌可能是潜在的良好助剂可使镍基催化剂具有较高活性与稳定性。

该项研究成果，我校物质学院2017级博士研究生陈姝樾为第一作者，杨波教授为通讯作者，上科大为第一单位。该研究获得了国家自然科学基金委员会“碳基能源转化利用的催化科学”重大研究计划培育项目支持，相关计算在校图信中心高性能计算平台与上海超算中心完成。

论文链接：<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acscatal.9b04429>





图注：不同金属助剂掺杂的镍基催化剂表面甲烷与二氧化碳解离自由能垒随表面碳吸附能的变化趋势。若甲烷解离能垒高于二氧化碳解离能垒则抗积碳能力较强，若二者均较低则催化活性较高。

分享到

