

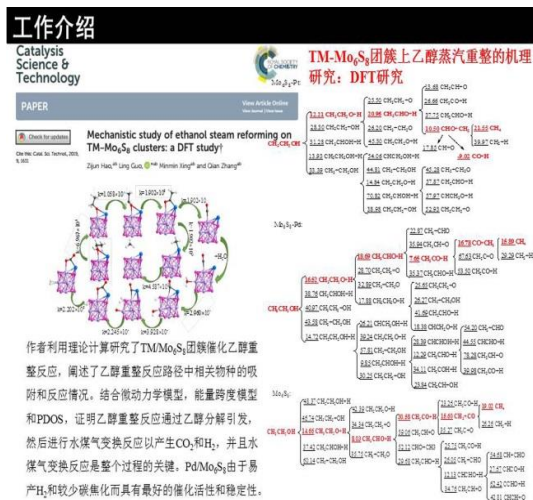
项目名称：金属纳米微粒催化 CO 氧化和水煤气变换反应的理论研究

主要完成单位：山西师范大学

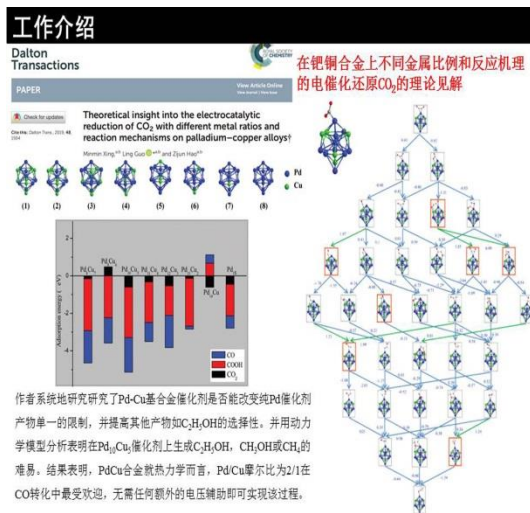
主要完成人：郭玲 曹赵茹 刘娜英 安晓瑜 任宁宁 董晓娜

获奖奖种及等级：山西省科学技术奖(自然科学类)三等奖

项目简介：有限化石燃料资源以及环境问题刺激了对替代能源的广泛深入研究。本项目进行 $M_1/Mo_6S_8/W_6S_8$ 单原子催化剂催化加氢、逆水煤气变换反应和醇类合成及重整的理论研究。将能量跨度模型这一数学工具巧妙引入并评判催化剂催化效率的高低，筛选最优催化剂，选择最佳机理。所选单原子催化剂（SAC）作为催化剂中的新星，其尺寸缩小至原子级别，使原子利用率最大化，可通过催化剂的配位数，量子尺寸效应以及与载体的相互作用来调节催化剂的电子结构，表现出优异的催化性能。所提出的三分子 Langmuir-Hinshelwood 反应机理，甲酸机理、甲酸盐机理和甲酰基机理为首次报道。研究发表论文 40 余篇，均被 SCI 收录，其中 SCI 2 区以上文章十余篇，他人正面引文分别发表在 Chem. Rev.、J. Phys. Chem. C、Int. J. Hydrogen Energ 等知名期刊。



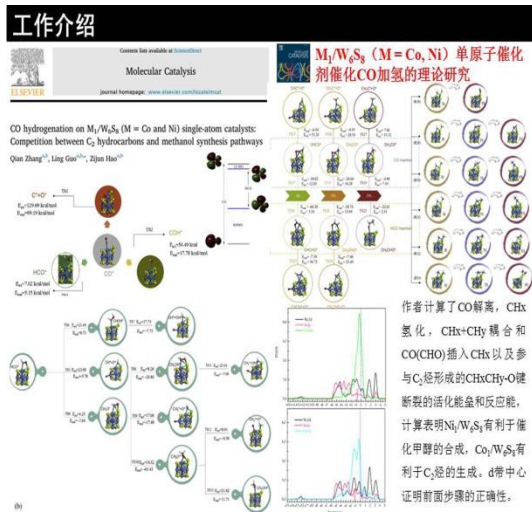
(1)



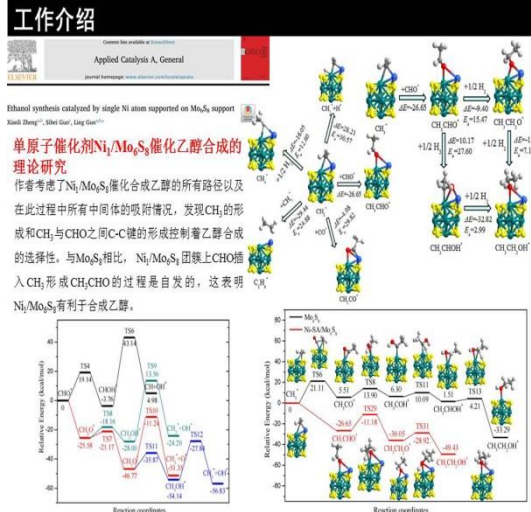
(2)

图1★ 文章“TM-Mo6S8 团簇上乙醇蒸汽重整的机理研究:DFT 研究”，发表于《Catalysis Science Technology》。运用 DFT 系统的研究 TM/Mo6S8 (TM = Pd, Pt) 催化乙醇重整反应的机理，并且寻找最佳的催化剂。该课题有助于设计和改进催化剂从而有利于氢气的形成。

图2★ 文章“PdCu 合金对 CO2 还原的电催化性能的研究”，发表于《Dalton Transactions》。通过构建八种模型，系统研究了 Pd-Cu 基合金催化剂是否能改变纯 Pd 催化剂产物单一的限制，并提高其他产物如 C2H5OH 的选择性。研究结果可为 CO2 转化为 CO 或其他有用的碳氢化合物设计经济有效的电催化剂提供启示。



(3)



(4)

图 3★ 文章“M₁/W₆S₈ (M = Co, Ni) 单原子催化剂催化 CO 加氢的理论研究”, 发表于《Molecular Catalysis》。研究在 M₁/W₆S₈ (M = Co, Ni) 单原子催化剂上催化甲醇合成和费托合成 (FTS) 中的 C₂ 烃的形成。研究为理解和开发用于 C₂ 烃和甲醇合成的新型 M₁/W₆S₈ (M = Co, Ni) 单原子催化剂提供理论基础。

图 4★ 文章“单原子催化剂 Ni₁/Mo₆S₈ 催化乙醇合成的理论研究”, 发表于《Applied Catalysis A, General》。系统地研究了 Ni₁/Mo₆S₈ 催化乙醇合成的催化性能, 并解释其催化机理。研究为理解、开发和设计催化乙醇合成的单原子催化剂提供依据。