

# 林丽利-未来三年研究计划

## 生物质基醇类储氢分子高效重整制氢催化剂的设计

### 1. 总体目标

本项目的总体研究目标是围绕高储氢密度的生物质基醇类储氢分子高效重整制氢催化剂的设计开发而展开。解决乙醇或多元醇中 C-C、C-H、O-H 键基元步骤的活化速率在界面活性位有效协同的难点;系统性认识醇类重整制氢反应网络及关键反应中间体转化,解决催化剂应用的基础科学与技术问题。

### 2. 研究背景

氢能是一种公认的高热值清洁能源,高位发热值达  $1.42 \times 10^2$  MJ/kg, 约是汽油发热值的三倍,被称为“能源货币”。在二十世纪七十年代第一次石油危机期间,氢能经济的概念首次提出并被广泛接受,期望在不远的将来将氢气作为支撑全球经济的主要能源平台,逐步替代现有的化石能源经济体系,最终实现向清洁高效低排放的氢循环能量体系过渡。氢能的应用包括三个环节,分别为氢燃料的制备、氢燃料的存储-输运和通过氢燃料电池实现化学能到电能的能源转化过程。随着光解水和电解水过程科学研究的推进和应用体系的发展,未来可实现大规模的利用清洁能源实现水中取氢,从而解决氢气的来源问题。但是,氢气的体积能量密度极低,当以气态氢形式储存时,即使压力高达 700-900 个大气压,氢气的体积密度能量仍然不到汽油柴油等液体燃料的 1/3。而且,这种特殊的高压储氢系统不仅价格昂贵,同时还需配备高压加氢站、高压氢气输送管路等大量额外基础设施。因此,如何有效地将大规模制备的氢气经济地进行存储和输运,直接关系到氢能是否方便快捷低成本的应用,也是目前氢能经济推进的主要瓶颈。

针对以上问题,“有机液体材料储氢-原位产氢”的间接储氢策略被提出。醇是一类理想的液体氢能载体,具有储氢密度高,理化性质与传统液体燃料相近等优点,可最大限度利用现有燃料化学品储运与分销网络。乙醇、多元醇等生物质基产品通过高效的重整制取氢气受到了广泛的关注,价廉高效重整产氢催化剂的开发是决定间接储氢策略能否实现的关键性因素。

### 3. 研究内容

1) 利用 Pt 与碳化钼载体的强相互作用，解析不同粒径纳米粒子在载体上的分散行为，界定纳米粒子的尺寸对分布形态的影响，构筑连续可调变的 Pt 金属中心，深入探究界面结构和电子性质对乙醇、乙二醇模型分子重整制氢性能的影响。

2) 对原子级分散与金属中心连续的 Pt 基催化剂进行复合一体化，有效调控 C-C, C-H 和 C-O 键活化基元步骤速率在金属-碳化钼界面的有效协同。利用表面敏感的原位表征技术、催化反应动力学研究手段与理论计算相结合，获得乙醇、乙二醇模型分子重整产氢反应网络的系统性认识和关键反应中间体转化的相关信息。理解催化剂选择性、稳定性进一步提升的限制性因素。

3) 基于连续金属中心-碳化钼催化剂的设计思路，构建以非贵金属为活性中心主体的双金属/ $\alpha$ -MoC 催化剂，确定最优双金属中心组成，优化反应性能。利用碳化钼表面双金属中心的协同催化作用，实现价廉高效醇类重整制氢催化剂的开发目标。

### 3. 工作方式

本项目将以既有的研究成果为基础，充分利用组内、浙江工业大学化工学院以及绿色化学合成技术国家重点实验室培育基地的工作基础和实验条件，开展原创性质的基础研究。并积极与北京、上海同步辐射中心合作开展原位表征实验，揭示催化剂表面结构和性能之间的关联。

### 4. 预期成果

1) 设计合成价廉高效的醇类重整产氢催化剂，明确催化剂活性和结构的关系，揭示催化反应机理。为产氢催化剂的设计和制备提供启示。

2) 研究成果将以论文形式呈现，预计在化学、能源类期刊发表论文 3-4 篇；撰写 1 篇有机液体储氢材料的综述；申请发明专利 1-2 项。

3) 培养研究生 3-4 人。