



2019年第2期



国家研究中心简讯

合肥微尺度物质科学国家研究中心召开 建设运行管理委员会、学术委员会第一次会议

1月22日上午，合肥微尺度物质科学国家研究中心建设运行管理委员会、学术委员会第一次会议在中国科学技术大学召开。会议分别由中国科学技术大学朱长飞副校长及中科院副秘书长、国家研究中心学术委员会主任高鸿钧院士主持。学术委员会委员田中群院士、薛其坤院士、包信和院士、李林院士、李亚栋院士、龚旗煌院士、谢毅院士、田志刚院士、窦贤康院士、徐红星院士、罗毅教授、陆亚林教授、严以京教授、申勇教授、卢征天教授参加了会议。应邀到会指导的有中国科学院前沿教育局王颖副局长、侯宏飞处长，安徽省科技厅罗平副厅长、李银安处长，安徽省发改委朱的娥处长。中国科学技术大学杨金龙副校长和有关职能部门负责人、国家研究中心研究骨干列席了会议。

国家研究中心建设运行管理委员会主任、中国科学技术大学校长包信和院士首先致辞，对与会的所有专家表示热烈的欢迎。包校长介绍了合肥微尺度物质科学国家研究中心于2017年11月获科技部批准组建，2018年3月正式运行后在基础研究方面取得的一系列重要成果，是我校基础研究、前沿研究和交叉研究的重要平台。期望研究中心进一步面向世界科技前沿，立足国内重大需求，多在基础性、战略性上下功夫，执着攻关创新，早出成果，多出成果。

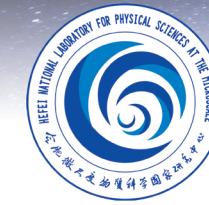
中科院前沿教育局王颖副局长随后致辞。希望国家研究中心在其不断的前进探索过程中，加大体制机制的创新，成为科研机构改革的试验田，成为青年杰出人才的重要培养基地。

会上，包信和校长向各位委员颁发了聘书，国家研究中心主任罗毅教授作了国家研究中心工作汇报，报告了中心一年来在队伍建设、人才培养、科研任务、公共平台、管理运行等方面的工作进展，介绍了中心取得的主要科研成果和今后的工作设想。随后，胡水明教授作了“探索发展尖端测量仪器”的工作汇报。

与会委员们对国家研究中心取得的工作成果给予了充分肯定，并对中心今后工作的规划和展望进行了热烈讨论，提出了建设性的意见和建议。



合肥微尺度物质科学国家研究中心简报



合肥微尺度物质科学国家研究中心
HEFEI NATIONAL LABORATORY FOR PHYSICAL SCIENCES AT THE MICROSCALE

2019年第2期 (总第163期)

合肥微尺度物质科学国家研究中心办公室

0551-63600458 hfnloff2@ustc.edu.cn

中国科大在高效去除氢气中微量CO研究方面 取得突破性进展

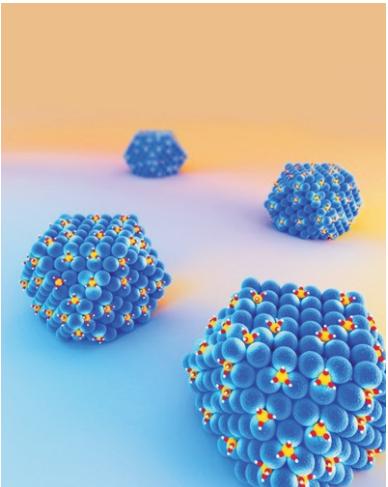


图1. $\text{Fe}_1(\text{OH})_x\text{-Pt}$ 单位点界面新型催化剂结构模型示意图。这里蓝色、黄色、红色、白色小球分别代表铂、铁、氧和氢原子。

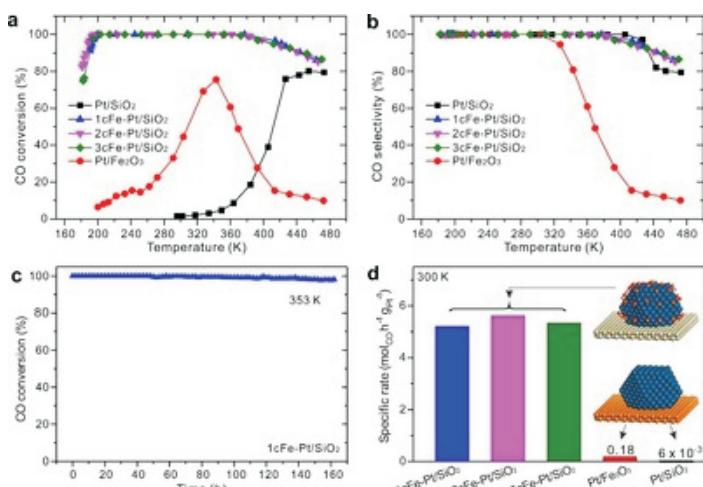


图2. 利用ALD方法制备出来的 1cFe-Pt/SiO_2 、 2cFe-Pt/SiO_2 、 3cFe-Pt/SiO_2 单位点界面催化剂和常规 Pt/SiO_2 、 $\text{Pt/Fe}_2\text{O}_3$ 催化剂在PROX反应中的催化性能对比。

中国科学技术大学路军岭教授、韦世强教授、杨金龙教授等课题组密切合作，利用原子层沉积技术（ALD），首次设计出一种新型 $\text{Fe}_1(\text{OH})_x\text{-Pt}$ 单位点界面催化剂结构（图1），并在低温高效去除氢气中微量CO制备高纯氢气方面取得突破性进展。研究成果于2019年1月31日在线发表在国际权威期刊《Nature》上。

该工作中，路军岭课题组充分利用ALD技术中的表面自限制反应以及二茂铁金属源在贵金属表面解离吸附和分子间空间位阻效应的特性，成功地在 SiO_2 负载的Pt金属纳米颗粒表面上，原子级精准地构筑出单位点 $\text{Fe}_1(\text{OH})_x$ 物种，进而促成了丰富且具有超高活性和高稳定性的 $\text{Fe}_1(\text{OH})_x\text{-Pt}$ 单位点界面催化活性中心的形成。在PROX反应中，研究人员利用该新型催化剂首次在 $\sim 75^\circ\text{C}$ 至 110°C 的超宽温度区间，成功实现了100%选择性地CO完全去除（图2a,b），极大突破了现有PROX催化剂工作温度相对较高且区间窄的两大局限性，为氢燃料电池在寒冷条件下频繁冷启动和连续运行期间避免CO中毒，提供了一种全方位的有效保护手段，从而为未来氢燃料电池汽车的推广扫清了一重大障碍。更难能可贵的是，该催化剂在模拟真实环境，即 CO_2 和水汽都存在的情况下，仍可表现出极佳的稳定性（图2c），且比质量催化活性（ $5.21 \text{ molCO} \cdot \text{gPt}^{-1}$ ）是传统 Pt/Fe_{203} 催化剂的30倍（图2d）。

韦世强教授课题组利用原位X射线吸收谱（XAFS）从实验上探测到 $\text{Fe}_1(\text{OH})_x$ 物种在PROX反应气氛中的结构是 $\text{Fe}_1(\text{OH})_3$ ，Fe原子与Pt纳米颗粒表面Pt原子形成Fe-Pt的金属键，而无明显的Fe-Fe键，并且惊奇地发现该物种具有超高还原特性，在室温就实现氢气还原生成 $\text{Fe}_1(\text{OH})_2$ ，揭示了其高催化活性的内在原因。王兵教授课题组利用扫描隧道电子显微镜（STM）研究了 FeOx ALD在Pt单晶表面的生长行为，观察到了亚纳米尺寸 FeOx 物种的形成，从而直接证明了在Pt表面上形成单分散Fe物种的可能性。

杨金龙教授课题组理论计算确定了 $\text{Fe}_1(\text{OH})_3$ 在Pt表面上的空间构型，证实Pt颗粒表面上形成的 $\text{Fe}_1(\text{OH})_x\text{-Pt}$ 单位点界面是其催化活性中心，并揭示了其催化反应机理：吸附的CO首先进攻其中一个OH，形成COOH表面中间物种；此后， O_2 在该界面处以极低的势垒活化；形成的原子O随后进攻COOH，最终生成 CO_2 。

该工作为人们设计高活性金属催化剂提供了新思路。

简报

合肥微尺度物质科学国家研究中心简报