

新催化剂可在低压下将二氧化碳转为甲醇

日期 2014-03-18 来源：新华网 来源：科技日报 作者：华凌 【大 中 小】

美国斯坦福大学、斯坦福直线加速器中心国家加速器实验室（SLAC）和丹麦技术大学组成的一个国际研究团队发现了一种将二氧化碳转化为甲醇的新型催化剂镍—镓（Ni5Ga3）。甲醇是塑料产品、粘合剂和溶剂的主要成分及有前景的运输燃料。相关研究成果发表在《科学》杂志在线版上。

该研究主要作者、SLAC的科学家费利克斯·斯图特说：“甲醇是在高压下用氢气、二氧化碳和天然气中的寻找低压条件下产生甲醇的方法，最终开发出利用清洁的氢生成甲醇的无污染制造过程。”

在世界范围内，每年生产涂料、聚合物、胶水和其他产品需要约65万吨甲醇。现有的甲醇厂内，天然气和煤气的“合成气”，然后该合成气通过由铜、锌和铝构成的催化剂在高压过程中转化成甲醇。

据每日科学网、物理学家组织网近日报道，斯图特和其同事花费了很多时间去研究甲醇合成及其工业生产时铜—锌—铝催化剂的活性位点，而后开始寻找能够在低压条件下，只使用氢气和二氧化碳合成甲醇的新催化剂。他们构建了一个庞大的计算机数据库，从中搜索出富有前途的催化剂，以取代在实验室里测试各种化合物的方式。该团队解释说：“该技术被称为计算材料设计。你可以得到完全基于计算机运算的新型功能材料。首先通过计算机进行实验测试。”

在数据库中，斯图特将铜—锌—铝催化剂与成千上万的其他材料相比，发现最有前途的候选是一个称为镍—镓。随后合成出镍和镓组成的固体催化剂。研究团队进行一系列的实验，以查看新的催化剂是否可在普通压力下生产。

实验室测试证实，计算机做出了正确的选择。在高温下，镍—镓比传统的铜—锌—铝催化剂能产生更多的甲醇。研究人员指出，镍比较丰富，虽然镓较昂贵，但被广泛应用于电子行业。这表明，新的催化剂最终可以扩大生产。