

# Пресс-релиз

15 декабря 2022 г.

## **Избыточное выделение и накопление водорода на графене с титановыми одноцентровыми катализаторами**

Избыточное выделение и накопление водорода для одноцентровых металлических катализаторов, включая одноатомные катализаторы (SAC) и одиночные нанокластерные катализаторы, были хорошо изучены для различных носителей, но все ещё остаются плохо изученными для инертных углеродных носителей. Здесь мы используем методы, основанные на синхротронном излучении, для исследования роли титановых одноцентровых катализаторов на графене в процессе избыточного выделения и накопления водорода. Результаты спектров, полученные нами на месте путем фотоэмиссии с угловым разрешением, демонстрируют открытие ширины запрещенной энергетической зоны, а спектр поглощения рентгеновских лучей обнаруживает образование углерод-водородных связей, что указывает на частичное гидрирование графена. С увеличением осаждения титана и воздействия водорода, атомы титана имеют тенденцию к агрегации с образованием нанокластерных катализаторов и дают 13,5%  $sp^3$ -гибридизированных атомов углерода, что соответствует емкости хранения водорода 1,11 м.д.% (исключая вес титановых нанокластеров, [Bhowmick, R. et al. J. Am. Chem. Soc. 2011, 133 (14), 5580]). Наши результаты демонстрируют, как простой процесс избыточного выделения в титановых одноатомных катализаторах может привести к ковалентной водородной связи на графене, тем самым обеспечивая стратегию рационального создания одноцентровых катализаторов на углеродном носителе.

Резюме исследования (на английском языке): [ACS Energy Lett., 7, 7, 2297-2303 \(2022\)](#)