



پیشرفت‌های راهبردی در کاتالیست‌های تبدیل دی‌اکسید کربن: از بینش‌های ترمودینامیکی تا مسیرهای الکتروشیمیایی و چشم‌اندازهای تجاری

ترگل نجاران طوسی^{۱*}، یگانه حسنی مقدم^۲، فاطمه حسن عربی^۲، الناز اسماعیلی رضاآبادی^۲، زهرا حسنی^۲
نیایش پویان‌مهر^۲

۱- نویسنده مسئول targolnt@gmail.com گروه مهندسی شیمی، واحد قوچان، دانشگاه آزاد اسلامی، قوچان، ایران

۲- نویسنده iaurstudents@gmail.com گروه شیمی، واحد رفسنجان، دانشگاه آزاد اسلامی، رفسنجان، ایران

خلاصه

افزایش غلظت دی‌اکسید کربن (CO_2) در جو زمین به‌عنوان یکی از مهم‌ترین عوامل گرمایش جهانی و تغییرات اقلیمی، ضرورت توسعه فناوری‌های نوین برای تبدیل و بهره‌برداری مجدد از این گاز را بیش از پیش آشکار کرده است. با وجود پایداری ترمودینامیکی بالای CO_2 و موانع سینتیکی در مسیر فعال‌سازی آن، طی دهه‌های اخیر پیشرفت‌های چشمگیری در طراحی کاتالیزورها و سامانه‌های واکنشی گزارش شده است. این مقاله مروری، رویکردهای گوناگون در زمینه فعال‌سازی و کاهش CO_2 را بررسی می‌کند؛ از تحلیل‌های ترمودینامیکی و مکانیزمی گرفته تا توسعه کاتالیزورهای نوین شامل نانوساختارهای فلزی، مواد دوبعدی و کاتالیزورهای تک‌اتمی. علاوه بر این، نوآوری‌های فناورانه در طراحی راکتورها—از فوتوکاتالیست‌ها و سامانه‌های الکتروشیمیایی تا رویکردهای فعال‌سازی دینامیکی—و نیز مطالعات تکنواقتصادی و مسیرهای تجاری‌سازی مورد بحث قرار گرفته‌اند. نتایج مرور حاضر نشان می‌دهد که ادغام دانش بنیادی در زمینه ترمودینامیک و سینتیک با طراحی پیشرفته‌ی مواد و سامانه‌ها، می‌تواند مسیرهای نوینی برای تبدیل پایدار CO_2 به سوخت‌ها و مواد شیمیایی ارزشمند فراهم سازد. در پایان، چالش‌های باقی‌مانده و چشم‌اندازهای آینده برای توسعه کاتالیزورهای کارآمدتر و مقیاس‌پذیرتر مطرح می‌شوند.

کلمات کلیدی: دی‌اکسید کربن، گرمایش جهانی، تغییرات اقلیمی، ترمودینامیک، سینتیک، فعال‌سازی، کاتالیزور، نانوساختار، مواد دوبعدی، فوتوکاتالیست، الکتروشیمی، تجاری‌سازی



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

۱. مقدمه

دی‌اکسید کربن (CO_2) یکی از مهم‌ترین گازهای گلخانه‌ای است که سهم قابل توجهی در گرمایش جهانی و تغییرات اقلیمی دارد. افزایش غلظت این گاز در اتمسفر ناشی از مصرف گسترده سوخت‌های فسیلی و فعالیت‌های صنعتی، تهدیدی جدی برای پایداری زیست‌محیطی سیاره محسوب می‌شود. از این‌رو، تبدیل و استفاده‌ی مجدد از CO_2 نه تنها می‌تواند به کاهش اثرات منفی زیست‌محیطی منجر شود، بلکه فرصتی برای تأمین پایدار انرژی و تولید مواد شیمیایی با ارزش افزوده بالا فراهم می‌کند. [1]

با این حال، فعال‌سازی و کاهش دی‌اکسید کربن از نظر ترمودینامیکی و سینتیکی چالشی جدی است. مولکول CO_2 به دلیل ساختار خطی و پیوندهای دوگانه‌ی قوی ($\text{C}=\text{O}$)، از پایداری بالایی برخوردار است و واکنش‌پذیری کمی دارد. برای غلبه بر این مانع، نیاز به وارد کردن انرژی قابل توجهی است تا بتوان پیوندهای آن را شکسته و مسیر واکنش‌های احیایی را فعال کرد. علاوه بر این، رقابت واکنش‌های جانبی مانند تولید هیدروژن در فرآیندهای الکتروشیمیایی، کارایی تبدیل CO_2 را کاهش می‌دهد. [2]

در طی چند دهه‌ی گذشته، پژوهش‌های گسترده‌ای در زمینه‌ی توسعه‌ی کاتالیزورهای ناهمگن، همگن و الکتروشیمیایی برای فعال‌سازی CO_2 صورت گرفته است. در رویکردهای اولیه، فلزات نجیب مانند نقره، طلا و مس به عنوان کاتالیزورهای مؤثر برای کاهش CO_2 شناخته شدند، اما هزینه‌ی بالا و پایداری محدود آن‌ها، تحقیقات را به سمت مواد ارزان‌تر و سازگارتر با محیط زیست سوق داد. اخیراً، نانوساختارهای فلزی، مواد دوبعدی (مانند گرافن و MXene)، و کاتالیزورهای تک‌اتمی به عنوان نسل جدیدی از سیستم‌های فعال در احیای CO_2 مورد توجه قرار گرفته‌اند. [3]

هدف این مقاله، مرور جامع پیشرفت‌های اخیر در زمینه‌ی رویکردهای کاتالیزوری و الکتروشیمیایی برای تبدیل دی‌اکسید کربن است. در این مرور، ابتدا اصول ترمودینامیکی و سینتیکی واکنش احیای CO_2 بررسی می‌شود، سپس نقش ساختار و ترکیب کاتالیزورها در کنترل مسیرهای واکنش و گزینش‌پذیری محصولات تحلیل می‌گردد. در نهایت، چالش‌ها، چشم‌اندازهای آینده و مسیرهای نوین برای طراحی کاتالیزورهای کارآمدتر مورد بحث قرار می‌گیرند.

2. مبانی نظری و مکانیسم‌های کلیدی

2.1 ترمودینامیک و سینتیک تبدیل CO_2 (انرژی آزاد و موانع فعال‌سازی):

دی‌اکسید کربن به دلیل ساختار خطی و پیوندهای دوگانه‌ی قوی ($\text{C}=\text{O}$) دارای پایداری ترمودینامیکی بالاست. آنتالپی استاندارد تشکیل آن حدود $-393.5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ گزارش شده است، که نشان‌دهنده‌ی حالت بسیار پایدار مولکول در شرایط استاندارد است. [4] این مقدار منفی بیانگر آن است که CO_2 در مقایسه با بسیاری از ترکیبات کربنی دیگر در پایین‌ترین سطح انرژی قرار دارد و بنابراین تبدیل آن به محصولات احیایی نیازمند تأمین انرژی اضافی است. از دیدگاه انرژی آزاد گیبس، واکنش‌های کاهش CO_2 معمولاً دارای ΔG مثبت هستند، به‌ویژه در مسیرهای چندالکترونی مانند تولید متانول یا هیدروکربن‌ها. این بدان معناست که واکنش‌ها به‌طور خودبه‌خودی رخ نمی‌دهند و نیازمند ورودی انرژی خارجی (حرارت، نور یا جریان الکتریکی) هستند. [5]



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

از منظر سینتیکی، مانع اصلی در فعال‌سازی CO_2 مربوط به تغییر شکل هندسی آن از حالت خطی به حالت خمیده است. این تغییر باعث پایین آمدن سطح انرژی اوربیتال LUMO و افزایش واکنش‌پذیری کربن مرکزی می‌شود، اما نیازمند صرف انرژی قابل توجهی است. به همین دلیل، تشکیل گونه‌های واسطه‌ای مانند رادیکال $\text{CO}_2^{\cdot-}$ یا یون فرمات (HCOO^-) به عنوان مراحل کلیدی در بسیاری از مسیرهای کاتالیستی شناخته می‌شوند. [6,7] موانع فعال‌سازی (E_a) برای واکنش‌های احیای CO_2 بسته به مسیر واکنش متفاوت‌اند. برای مثال، کاهش دوالکترونی به CO یا HCOOH دارای مانع انرژی پایین‌تر (حدود 0.1–0.2 ولت نسبت به الکترودهیدروژن) است، در حالی که مسیرهای چندالکترونی برای تولید CH_4 یا C_2H_4 نیازمند غلبه بر موانع بزرگ‌تر و انتقال تعداد بیشتری پروتون و الکترون هستند. [8] این تفاوت‌ها توضیح می‌دهند که چرا در شرایط عملی، محصولات ساده‌تر مانند CO و HCOOH غالب‌اند، در حالی که تولید سوخت‌های چندکربنه نیازمند طراحی دقیق کاتالیست و شرایط واکنشی است. [9] به‌طور خلاصه، ترکیب پایداری ترمودینامیکی بالا و موانع سینتیکی قابل توجه، فعال‌سازی CO_2 را به یکی از چالش‌های اصلی در شیمی پایدار تبدیل کرده است. درک این مبانی نظری، پایه‌ای برای طراحی کاتالیست‌های نوین و انتخاب مسیرهای واکنشی کارآمدتر فراهم می‌کند.

۲.۲. مکانیسم‌های فعال‌سازی CO_2 : (فعال‌سازی از طریق H_2 ، الکترون و نور)

۱. فعال‌سازی با هیدروژن: (Hydrogen-assisted activation): در بسیاری از واکنش‌های کاتالیستی

ناهمگن، حضور هیدروژن نقش کلیدی در فعال‌سازی CO_2 دارد. هیدروژن می‌تواند به‌طور مستقیم با CO_2 واکنش داده و گونه‌های واسطه‌ای مانند فرمات (HCOO^-) یا کربوکسیل (COOH^-) را تشکیل دهد. این مسیر معمولاً از طریق مکانیسم لانگمویر-هینشلوود (واکنش گونه‌های جذب‌شده روی سطح (یا ایل-ریدیدیل) واکنش گونه‌ی گازی با گونه‌ی جذب‌شده (رخ می‌دهد. [10] در واکنش‌های متاناسیون (Sabatier reaction)، هیدروژن علاوه بر کاهش CO_2 ، سطح فلزی کاتالیست را نیز در حالت فعال نگه می‌دارد. [11]

۲. فعال‌سازی با الکترون: (Electron transfer) انتقال الکترون به مولکول CO_2 باعث تشکیل رادیکال

آنیون $\text{CO}_2^{\cdot-}$ می‌شود که هندسه‌ی خمیده دارد و واکنش‌پذیری بالاتری نسبت به حالت خطی دارد. این گونه‌ی واسطه‌ای می‌تواند به مسیرهای مختلفی مانند تولید CO ، HCOOH یا حتی گونه‌های چندکربنه وارد شود. [8,10] در الکتروشیمی، این فرآیند به شدت وابسته به نوع فلز کاتالیست، انرژی فرمی سطح و شرایط الکترولیت است. برای مثال، فلزاتی مانند Au و Ag تمایل بالایی به تشکیل CO دارند، در حالی که Cu قادر است مسیرهای چندالکترونی را برای تولید هیدروکربن‌ها و الکل‌ها فعال کند. [8]

۳. فعال‌سازی با نور: (Photocatalytic activation) در فوتوکاتالیست‌ها، جذب فوتون توسط نیمه‌رسانا

باعث ایجاد جفت الکترون-حفره می‌شود. الکترون‌های برانگیخته به نوار رسانش منتقل شده و می‌توانند به CO_2 تزریق شوند، در حالی که حفره‌ها واکنش‌های اکسایشی را تسهیل می‌کنند. این فرآیند امکان تولید گونه‌های واسطه‌ای مانند $\text{CO}_2^{\cdot-}$ و سپس تبدیل آن‌ها به محصولات احیایی را فراهم می‌کند. [10] استفاده از منابع پروتون (مانند آب) در کنار فوتوکاتالیست‌ها، مسیرهای چندالکترونی را برای تولید متانول یا متان فعال می‌سازد. با این حال، رقابت واکنش جانبی تولید H_2 یکی از چالش‌های اصلی در این مسیر است. [12]



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

۲.۳. مدل‌سازی نظری و شبیه‌سازی (DFT): نقش محاسبات در طراحی کاتالیزور

مدل‌سازی نظری و شبیه‌سازی‌های کوانتومی، به‌ویژه نظریه تابع چگالی (DFT)، ابزار قدرتمندی برای درک مکانیسم‌های فعال‌سازی و کاهش CO_2 محسوب می‌شوند. این روش‌ها امکان بررسی دقیق ساختار الکترونی، انرژی‌های جذب و مسیرهای واکنش را فراهم می‌کنند و به‌عنوان مکملی برای آزمایش‌های تجربی عمل می‌نمایند. [13,18] یکی از مهم‌ترین کاربردهای DFT در حوزه‌ی کاهش CO_2 ، تعیین انرژی آزاد گیبس و موانع فعال‌سازی گونه‌های واسطه‌ای مانند CO_2^- ، COOH^* و HCOO^* است. این محاسبات نشان می‌دهند که پایداری و انرژی جذب این واسطه‌ها روی سطح کاتالیست، عامل تعیین‌کننده در گزینش‌پذیری محصول نهایی است. برای مثال، محاسبات DFT روی کاتالیست‌های مسی نشان داده‌اند که انرژی جذب مناسب CO^* روی سطح Cu، مسیرهای چندالکترونی را برای تولید C_2H_4 و $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ فعال می‌کند. [13] DFT همچنین در طراحی کاتالیست‌های نوین مانند کاتالیست‌های تک‌اتمی (SACs) نقش کلیدی دارد. با استفاده از شبیه‌سازی، می‌توان محیط‌های کئوردیناسیونی مختلف (مانند $\text{M}-\text{N}_4$ یا $\text{M}-\text{O}_4$) را بررسی کرد و اثر آن‌ها بر پایداری واسطه‌ها و فعالیت کاتالیستی را پیش‌بینی نمود. [18]

این رویکرد به محققان اجازه می‌دهد تا قبل از سنتز آزمایشگاهی، ساختارهای بهینه را شناسایی کنند و هزینه‌ی توسعه‌ی مواد جدید را کاهش دهند. علاوه بر این، ترکیب DFT با روش‌های چندمقیاسی مانند دینامیک مولکولی (MD)، مونت کارلو جنبشی (KMC) و شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) امکان بررسی همزمان رفتار مولکولی، سینتیک سطحی و عملکرد راکتور را فراهم می‌سازد. [13] چنین رویکردی می‌تواند طراحی کاتالیست‌ها و سیستم‌های واکنشی را از سطح اتمی تا مقیاس صنعتی هدایت کند. به‌طور خلاصه، مدل‌سازی نظری و شبیه‌سازی‌های DFT نه تنها درک عمیق‌تری از مکانیسم‌های فعال‌سازی CO_2 ارائه می‌دهند، بلکه به‌عنوان راهنمایی برای طراحی کاتالیست‌های کارآمدتر و مقیاس‌پذیرتر عمل می‌کنند. این رویکردها پلی میان دانش بنیادی و کاربردهای صنعتی ایجاد کرده‌اند و مسیر آینده‌ی توسعه‌ی فناوری‌های کاهش CO_2 را روشن می‌سازند.

۳. تبدیل کاتالیزوری CO_2

۳.۱. هیدروژناسیون حرارتی (Thermal Hydrogenation)

هیدروژناسیون حرارتی CO_2 یکی از مسیرهای کلاسیک برای تبدیل این گاز پایدار به محصولات ارزشمند مانند متان (CH_4)، متانول (CH_3OH) و سایر هیدروکربن‌ها است. این فرآیند معمولاً در حضور کاتالیست‌های فلزی و در دما و فشار بالا انجام می‌شود. واکنش ساباتییه ($\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$) نمونه‌ی شناخته‌شده‌ای از این مسیر است که از اوایل قرن بیستم برای تولید متان مورد استفاده قرار گرفته است. [11] مکانیسم اصلی شامل جذب CO_2 بر سطح فلزی، فعال‌سازی آن از طریق خمیده شدن هندسه و انتقال الکترون، و سپس واکنش با هیدروژن جذب‌شده است. گونه‌های واسطه‌ای کلیدی در این مسیر شامل فرمات (HCOO)،



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

کربوکسیل (COOH) و CO جذب شده هستند که بسته به نوع کاتالیست و شرایط عملیاتی می‌توانند به محصولات مختلفی منجر شوند. [10]

کاتالیست‌های رایج برای هیدروژناسیون حرارتی شامل فلزات واسطه مانند Ni, Co, Fe و Cu هستند. نیکل به‌عنوان یکی از مؤثرترین کاتالیست‌ها برای واکنش ساباتیو شناخته می‌شود، در حالی که کاتالیست‌های مبتنی بر مس بیشتر برای تولید متانول و سایر اکسیژنه‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرند [21]. افزودن فلزات قلیایی یا پشتیبان‌های اسیدی-بازی (مانند Al_2O_3 یا CeO_2) می‌تواند فعالیت و گزینش‌پذیری کاتالیست‌ها را بهبود بخشد. [8]

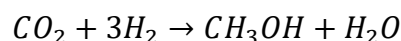
از نظر ترمودینامیکی، واکنش‌های هیدروژناسیون CO_2 معمولاً گرمازا هستند و در دماهای پایین‌تر گزینش‌پذیری بالاتری به سمت محصولات احیایی مانند متانول نشان می‌دهند. با این حال، سرعت واکنش در دماهای پایین محدود است و نیاز به افزایش دما برای دستیابی به نرخ تبدیل بالاتر وجود دارد. این موضوع چالش کلاسیک میان گزینش‌پذیری و فعالیت را در طراحی کاتالیست‌ها نشان می‌دهد. [19]

به‌طور کلی، هیدروژناسیون حرارتی CO_2 همچنان یکی از مسیرهای اصلی در تبدیل کاتالیزوری محسوب می‌شود و به‌عنوان مبنای بسیاری از فناوری‌های نوین (مانند راکتورهای ساختاریافته و فعال‌سازی دینامیکی) عمل می‌کند. درک دقیق مکانیسم‌های سطحی و واسطه‌های واکنشی در این فرآیند، کلید طراحی کاتالیست‌های پایدارتر و کارآمدتر برای آینده است.

۳.۱.۱. تولید متانول (CH_3OH): بررسی کاتالیزورهای $Cu/ZnO/Al_2O_3$ و آلیاژی

۳.۱.۱. تولید متانول (CH_3OH)

تولید متانول از CO_2 و H_2 یکی از مسیرهای کلیدی در تبدیل کاتالیزوری حرارتی است که علاوه بر کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای، امکان تولید یک ماده‌ی پایه‌ای برای صنایع شیمیایی و انرژی را فراهم می‌سازد. واکنش اصلی به صورت زیر بیان می‌شود: (۱)



این واکنش گرمازا بوده و در دماهای نسبتاً پایین ($200-300^\circ C$) و فشارهای بالا (50–100 bar) به‌طور صنعتی انجام می‌شود. [20]

- **کاتالیزورهای $Cu/ZnO/Al_2O_3$:** سامانه‌ی سه‌جزئی مس-اکسید روی-آلومینا به‌عنوان کاتالیست مرجع در سنتز صنعتی متانول شناخته می‌شود. نقش Cu به‌عنوان سایت فعال، ZnO به‌عنوان پایدارکننده و Al_2O_3 به‌عنوان پایه‌ی مکانیکی تعریف شده است. [10,20] مطالعات نشان داده‌اند که گونه‌های واسطه‌ای مانند فرمات ($HCOO^*$) و CO جذب شده روی سطح Cu نقش کلیدی در مسیر تولید متانول دارند.
- **کاتالیزورهای آلیاژی و اصلاح شده:** آلیاژهای Cu با فلزات دیگر مانند Zr , Ga یا Pd مسیر واکنش را به سمت تولید متانول هدایت می‌کنند. [8] همچنین پشتیبان‌های اسیدی-بازی مانند CeO_2 یا ZrO_2 موجب افزایش تعداد سایت‌های فعال و کاهش انرژی فعال‌سازی شده‌اند. [21]

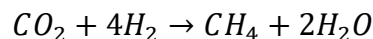


دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

- چالش‌ها و چشم‌انداز: اگرچه $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ همچنان کاتالیست اصلی در صنعت است، مشکلاتی مانند کاهش پایداری، تجمع ذرات Cu و نیاز به فشارهای بالا وجود دارد. تحقیقات اخیر بر طراحی نانوساختارهای پایدارتر و کاتالیست‌های تک‌اتمی Cu متمرکز شده‌اند. [19,21]

۳.۱.۲. تولید متان: واکنش ساباتیو و کاتالیست‌های Ni و Ru

تولید متان از CO_2 و H_2 یکی از مسیرهای کلاسیک و صنعتی در تبدیل کاتالیزوری حرارتی است. واکنش ساباتیو به صورت زیر بیان می‌شود: (۲)



این واکنش گرمازا بوده و در دماهای $250\text{--}400^\circ\text{C}$ و فشارهای متوسط تا بالا انجام می‌شود. از نظر ترمودینامیکی، واکنش در دماهای پایین‌تر گزینش‌پذیری بالاتری به سمت متان دارد، اما سرعت واکنش محدود است؛ در دماهای بالاتر نرخ تبدیل افزایش می‌یابد ولی گزینش‌پذیری کاهش می‌یابد. [11,10]

- کاتالیست‌های Ni : نیکل به عنوان کاتالیست مرجع شناخته می‌شود Ni . به دلیل قیمت پایین، فراوانی و فعالیت بالا، انتخاب اصلی در بسیاری از کاربردهای صنعتی است. گونه‌های واسطه‌ای کلیدی شامل CO جذب شده و فرمات هستند که روی سطح Ni تشکیل می‌شوند. با این حال، مشکلاتی مانند تجمع ذرات و کاهش پایداری وجود دارد. برای رفع این چالش، پشتیبان‌های نوین مانند Al_2O_3 ، CeO_2 ، ZrO_2 و SiO_2 به کار گرفته شده‌اند. [10,20]

- کاتالیست‌های Ru : روتنیوم فعالیت بالاتری نسبت به Ni دارد، اما هزینه‌ی بالای آن محدودیت ایجاد می‌کند. ترکیب Ru با پشتیبان‌های پایدار مانند TiO_2 یا CeO_2 عملکرد را افزایش می‌دهد. [8,21]

- نوآوری‌ها: استفاده از پشتیبان‌های نانوساختاری و مواد دوبعدی مانند گرافن و MXene موجب افزایش پراکندگی فلز و راندمان واکنش می‌شود. [19,21]

چشم‌انداز: اگرچه Ni همچنان کاتالیست اصلی در صنعت است، ترکیب آن با پشتیبان‌های نوین و افزودن فلزات کمکی می‌تواند عملکرد آن را بهبود دهد. Ru به عنوان گزینه‌ای با فعالیت بالاتر مطرح است، اما هزینه‌ی آن مانع استفاده‌ی گسترده می‌شود. مسیر آینده بر طراحی کاتالیست‌های پایدارتر، نانوساختارهای نوین و استفاده از پشتیبان‌های هوشمند متمرکز خواهد بود.

۳.۱.۳. مسیرهای ترکیبی (هیدروژناسیون + اسید-باز روی اکسیدها)

علاوه بر مسیرهای کلاسیک هیدروژناسیون فلزی، ترکیب مکانیزم‌های هیدروژناسیون با H_2 و فعال‌سازی اسید-باز روی اکسیدها یکی از رویکردهای نوین در تبدیل CO_2 محسوب می‌شود. در این روش، فلزات واسطه (مانند Ni یا Cu) وظیفه‌ی فعال‌سازی و شکستن مولکول H_2 را بر عهده دارند، در حالی که اکسیدهای فلزی (مانند CeO_2 ، ZrO_2 ، MgO یا TiO_2) به عنوان سایت‌های اسیدی-بازی عمل کرده و جذب و خمیده‌سازی CO_2 را تسهیل می‌کنند. [10,21]

مکانیسم CO_2 : ابتدا روی سایت‌های بازی اکسید (O^{2-} یا OH^-) سطح جذب می‌شود و گونه‌هایی مانند کربنات یا بی‌کربنات تشکیل می‌دهد. سپس هیدروژن فعال شده روی سطح فلزی به این گونه‌ها منتقل شده و واسطه‌های



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

فرمات (HCOO) یا کربوکسیل (COOH) ایجاد می‌شوند. این واسطه‌ها می‌توانند به مسیرهای مختلفی مانند تولید CO، متانول یا متان وارد شوند. [10]

مزایا:

- افزایش گزینش پذیری به سمت محصولات اکسیژنه (مانند متانول یا اسیدهای آلی)
- کاهش انرژی فعال‌سازی به دلیل همکاری بین سایت‌های فلزی و اسید-باز
- امکان تنظیم فعالیت با تغییر ترکیب و نسبت فلز-اکسید

نمونه‌های کاتالیست:

- $\text{Cu/ZrO}_2 \rightarrow$ گزینش‌پذیری بالا به سمت متانول
 - $\text{Ni/CeO}_2 \rightarrow$ فعالیت بالا در واکنش ساباتیو و پایداری بیشتر نسبت به $\text{Ni/Al}_2\text{O}_3$
 - ترکیب‌های دو فلزی مانند Cu-Ni/ZrO_2 که همزمان مسیرهای CO و CH_4 را فعال می‌کنند [8,20]
- چالش‌ها:** با وجود مزایا، این مسیرها همچنان با مشکلاتی مانند تجمع ذرات فلزی، تغییر ساختار اکسیدها در دماهای بالا و رقابت واکنش جانبی تولید H_2 مواجه‌اند. تحقیقات اخیر بر طراحی نانوساختارهای پایدارتر و استفاده از مواد دوبعدی مانند MXene یا گرافن به عنوان پشتیبان متمرکز شده‌اند. [19]

۳.۲. مسیرهای فوتوکاتالیستی و الکتروشیمیایی (Photocatalytic & Electrochemical Pathways)

۳.۲.۱. فوتوکاتالیست‌ها (Photocatalysis)

در این رویکرد، انرژی نور خورشید به عنوان منبع اصلی برای فعال‌سازی CO_2 استفاده می‌شود. نیمه‌رساناهایی مانند ZnO ، TiO_2 ، $\text{g-C}_3\text{N}_4$ و ترکیبات دوبعدی، با جذب فوتون، جفت الکترون-حفره تولید می‌کنند. الکترون‌های برانگیخته به نوار رسانش منتقل شده و به CO_2 تزریق می‌شوند، در حالی که حفره‌ها واکنش‌های اکسایشی را تسهیل می‌کنند. [10]

- **مزایا:** استفاده از انرژی تجدیدپذیر، امکان تولید مستقیم سوخت‌های خورشیدی
- **چالش‌ها:** بازترکیب سریع الکترون-حفره، رقابت واکنش جانبی تولید H_2 و بازده پایین در مقیاس صنعتی [12]
- **نوآوری‌ها:** طراحی فوتوکاتالیست‌های هیبریدی (فلز-نیمه‌رسانا)، استفاده از نقاط کوانتومی و مهندسی نقص‌های سطحی برای افزایش جداسازی بار [8]

۳.۲.۲. الکتروشیمیایی (Electrochemical Reduction, eCO₂RR)

کاهش الکتروشیمیایی CO_2 یکی از پرکاربردترین مسیرهای نوین است که با استفاده از جریان الکتریکی و کاتالیست‌های فلزی یا تک‌اتمی انجام می‌شود. این فرآیند در شرایط محیطی (دمای اتاق و فشار اتمسفری) قابل اجراست و می‌تواند محصولات متنوعی از CO و HCOOH تا CH_4 و C_2H_4 تولید کند. [13,19]

- **مکانیسم:** انتقال الکترون به CO_2 و تشکیل گونه‌های واسطه‌ای مانند CO_2^- ، COOH^* و HCOO^*



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

- کاتالیست‌ها Au و Ag برای تولید CO با راندمان بالا، Sn و Bi برای تولید فرمات، و Cu به‌عنوان تنها فلز با توانایی تولید محصولات چندکربنه [8] (C_2+)
- مزایا: امکان اتصال مستقیم به منابع انرژی تجدیدپذیر، شرایط عملیاتی ملایم و کنترل‌پذیری مسیر واکنش با تغییر پتانسیل
- چالش‌ها: رقابت واکنش جانبی تولید H_2 ، پایداری محدود کاتالیست‌ها و نیاز به افزایش چگالی جریان برای مقیاس صنعتی [19]
- نوآوری‌ها: طراحی کاتالیست‌های تک‌اتمی [19] (SACs)، مدل‌سازی چندمقیاسی برای بهینه‌سازی مسیرهای واکنش [13]، و توسعه‌ی راکتورهای غشایی و جریان پیوسته برای افزایش بازده [20]

۳.۳. مسیرهای پلاسما و فعال‌سازی دینامیکی

۳.۳.۱. فعال‌سازی پلاسما

- پلاسما به‌عنوان حالت چهارم ماده، شامل گازهای یونیزه با الکترون‌های پرانرژی است که می‌توانند CO_2 را در شرایط محیطی فعال کنند. در این روش، انرژی ورودی به‌صورت میدان الکتریکی یا تخلیه‌ی دی‌الکتریک (DBD) اعمال می‌شود و الکترون‌های پرانرژی قادرند پیوندهای $C=O$ را بشکنند [16].
- مزایا: امکان فعال‌سازی CO_2 در دماهای پایین، کاهش انرژی فعال‌سازی، و افزایش گزینش‌پذیری به سمت محصولات خاص مانند CO یا متانول.
 - چالش‌ها: بازده انرژی پایین، نیاز به طراحی دقیق راکتور و کنترل شرایط تخلیه، و رقابت واکنش‌های جانبی [23].
 - نوآوری‌ها: ترکیب پلاسما با کاتالیست‌های فلزی یا اکسیدی (Plasma–Catalyst Synergy) که موجب افزایش نرخ تبدیل و تغییر مسیر واکنش می‌شود [22].

۳.۳.۲. فعال‌سازی دینامیکی

- مفهوم جدیدی که اخیراً معرفی شده، استفاده از برخوردهای پرانرژی گاز واکنش با ذرات کاتالیست برای ایجاد سایت‌های فعال تازه است. در این حالت، سطح کاتالیست به‌طور مداوم بازسازی می‌شود و مکان‌های واکنشی جدید با انرژی فعال‌سازی پایین‌تر ایجاد می‌گردند [22].
- نمونه: کاتالیست‌های Cu/Al_2O_3 در راکتورهای فعال‌سازی دینامیکی توانسته‌اند گزینش‌پذیری متانول را از کمتر از ۴۰٪ به بیش از ۹۵٪ افزایش دهند و بازده فضا-زمان را تا شش برابر ارتقا دهند.



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

- **مزایا:** جلوگیری از تجمع و سینترینگ ذرات فلزی، افزایش پایداری و تغییر مسیر واکنش به سمت محصولات مطلوب.
- **چالش‌ها:** نیاز به طراحی دقیق راکتور، کنترل انرژی برخورد و فشار گاز، و درک کامل مکانیسم‌های سطحی.
- **چشم‌انداز:** این رویکرد می‌تواند مسیرهای جدیدی برای کشف واکنش‌های کاتالیزوری و افزایش کارایی فرآیندهای سنتی فراهم کند. [22]

۴. چالش‌ها و چشم‌انداز آینده

- ۴.۱ چالش‌های ترمودینامیکی و سینتیکی

یکی از بزرگ‌ترین موانع در تبدیل CO_2 ، پایداری ترمودینامیکی بالای این مولکول و موانع سینتیکی مرتبط با فعال‌سازی آن است. همان‌طور که در بخش مبانی نظری اشاره شد، انرژی آزاد گیبس برای بسیاری از مسیرهای احیای CO_2 مثبت است و واکنش‌ها به‌طور خودبه‌خودی رخ نمی‌دهند [۲۱]. این موضوع ضرورت استفاده از منابع انرژی خارجی (حرارت، نور یا جریان الکتریکی) را نشان می‌دهد. از دیدگاه سینتیکی، تغییر شکل هندسه‌ی خطی CO_2 به حالت خمیده و تشکیل گونه‌های واسطه‌ای مانند CO_2^- یا فرمات نیازمند صرف انرژی قابل توجهی است [۱۰]. همین امر باعث می‌شود که واکنش‌های چندالکترونی (مانند تولید CH_4 یا C_2H_4) با موانع فعال‌سازی بزرگ‌تر مواجه شوند و در شرایط عملی، محصولات ساده‌تر مانند CO یا HCOOH غالب باشند [8].

چالش‌های کلیدی در این حوزه عبارت‌اند از:

- نیاز به کاهش انرژی فعال‌سازی از طریق طراحی کاتالیست‌های نوین
- کنترل رقابت واکنش‌های جانبی مانند تولید H_2 در فرآیندهای الکتروشیمیایی
- افزایش گزینش‌پذیری به سمت محصولات چندکربنه با ارزش افزوده بالا

۴/۲. چالش‌های مواد و کاتالیست‌ها (پایداری، گزینش‌پذیری، هزینه)

یکی از مهم‌ترین موانع در توسعه‌ی فناوری‌های تبدیل CO_2 ، محدودیت‌های مربوط به مواد و کاتالیست‌ها است. اگرچه پیشرفت‌های چشمگیری در طراحی نانو ساختارها، کاتالیست‌های تک‌اتمی و سامانه‌های هیبریدی حاصل شده، اما چالش‌های اساسی همچنان باقی مانده‌اند



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

پایداری (Stability): بسیاری از کاتالیست‌های فلزی مانند Ni، Cu یا حتی فلزات نجیب Au،

Ag، Ru در طول واکنش دچار مشکلاتی نظیر تجمع ذرات (sintering)، تغییر فاز یا مسمومیت سطحی توسط واسطه‌ها می‌شوند [۸، ۱۰]. این پدیده‌ها موجب کاهش سطح فعال و افت راندمان در طولانی‌مدت می‌گردند. طراحی پشتیبان‌های پایدار (Al_2O_3 ، ZrO_2 ، CeO_2) و استفاده از ساختارهای متخلخل یا دوبعدی (گرافن، MXene) از راهکارهای پیشنهادی برای افزایش پایداری هستند. [19]

گزینش‌پذیری (Selectivity): یکی از چالش‌های اصلی در کاهش CO_2 ، کنترل مسیر واکنش به سمت محصول مطلوب است. به‌طور معمول، محصولات ساده‌تر مانند CO و HCOOH غالب‌اند، در حالی که تولید سوخت‌های چندکربنه (C_2H_4 ، $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) نیازمند طراحی دقیق سایت‌های فعال و کنترل انرژی جذب واسطه‌هاست [۱۳، ۱۹]. رقابت واکنش جانبی تولید H_2 در فرآیندهای الکتروشیمیایی نیز گزینش‌پذیری را کاهش می‌دهد. [12]

• **هزینه (Cost):** فلزات نجیب مانند Au، Ag و Ru فعالیت و گزینش‌پذیری بالایی دارند، اما هزینه‌ی بالای آن‌ها مانع استفاده‌ی گسترده در صنعت می‌شود [۸]. به همین دلیل، تحقیقات اخیر بر استفاده از فلزات ارزان‌تر (Ni، Fe، Sn، Bi) و طراحی کاتالیست‌های تک‌اتمی با بارگذاری کم فلز متمرکز شده‌اند [۱۹]. همچنین ترکیب فلزات ارزان با پشتیبان‌های هوشمند می‌تواند عملکردی مشابه فلزات نجیب ایجاد کند.

• **مقیاس‌پذیری (Scalability):** حتی اگر کاتالیست‌ها در آزمایشگاه عملکرد عالی داشته باشند، انتقال آن‌ها به مقیاس صنعتی با چالش‌های جدی همراه است. مسائل مربوط به سنتز در مقیاس بزرگ، یکنواختی ساختار و هزینه‌ی تولید مانع تجاری‌سازی سریع می‌شوند. [19]

۴.۳. چالش‌های فناورانه و طراحی راکتور

علاوه بر محدودیت‌های ترمودینامیکی و مواد، یکی از موانع اساسی در مسیر تجاری‌سازی فناوری‌های تبدیل CO_2 ، طراحی و مهندسی راکتورهای کارآمد است. حتی اگر کاتالیست‌ها عملکرد عالی در مقیاس آزمایشگاهی داشته باشند، انتقال آن‌ها به مقیاس صنعتی نیازمند حل چالش‌های پیچیده‌ی مهندسی است. [12، 19]

۱. انتقال جرم و انرژی (Mass & Energy Transfer): در بسیاری از فرآیندهای کاتالیزوری، به‌ویژه واکنش‌های گاز-جامد، محدودیت انتقال جرم مانع دستیابی به نرخ تبدیل بالا می‌شود. طراحی راکتورهای متخلخل، جریان پیوسته و ساختاریافته می‌تواند این محدودیت‌ها را کاهش دهد [۱۱]. همچنین مدیریت انتقال حرارت در واکنش‌های گرمازا مانند ساباتییه ضروری است تا از داغ‌شدن بیش از حد و کاهش گزینش‌پذیری جلوگیری شود. [10]



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

۲. مقیاس‌پذیری (Scalability): راکتورهایی که در مقیاس آزمایشگاهی کارآمد هستند، اغلب در مقیاس صنعتی با مشکلاتی مانند افت فشار، ناهمگنی جریان و کاهش راندمان مواجه می‌شوند. توسعه‌ی راکتورهای غشایی، جریان پیوسته و طراحی‌های مدولار از راهکارهای نوین برای افزایش مقیاس‌پذیری محسوب می‌شوند. [19]

۳. ادغام با انرژی تجدیدپذیر (Integration with Renewables): برای کاهش واقعی انتشار CO_2 ، فرآیندهای تبدیل باید با منابع انرژی تجدیدپذیر (خورشیدی، بادی) ادغام شوند. این موضوع نیازمند طراحی راکتورهایی است که بتوانند با ورودی‌های متناوب و ناپایدار انرژی سازگار باشند. الکتروشیمی و فوتوکاتالیست‌ها نمونه‌هایی هستند که به‌طور مستقیم با انرژی تجدیدپذیر قابل اتصال‌اند، اما چالش‌های پایداری و بازده همچنان باقی است [12,13].

۴. نوآوری‌های جدید: (Innovations)

- راکتورهای ساختاریافته (Structured Reactors) با سطح تماس بالا و کنترل دقیق جریان
 - راکتورهای فعال‌سازی دینامیکی (DAR) که سطح کاتالیست را به‌طور مداوم بازسازی می‌کنند [22]
 - ترکیب پلاسما-کاتالیست برای افزایش نرخ تبدیل در شرایط محیطی [8]
۵. هزینه و بهره‌وری انرژی: (Cost & Energy Efficiency) حتی اگر راندمان شیمیایی بالا باشد، هزینه انرژی و طراحی راکتور می‌تواند مانع تجاری‌سازی شود. تحلیل‌های تکنواقتصادی نشان داده‌اند که کاهش هزینه انرژی و افزایش چگالی جریان در راکتورهای الکتروشیمیایی کلید موفقیت صنعتی است. [19]

۴.۴. چالش‌های اقتصادی و تجاری‌سازی

حتی اگر مسیرهای کاتالیزوری و نوین فعال‌سازی CO_2 از نظر علمی و آزمایشگاهی موفق باشند، انتقال آن‌ها به مقیاس صنعتی با چالش‌های اقتصادی جدی همراه است. تحلیل‌های تکنواقتصادی نشان می‌دهند که هزینه انرژی، مواد اولیه و زیرساخت‌ها نقش تعیین‌کننده در امکان‌پذیری تجاری‌سازی دارند. [19]

۱. هزینه انرژی: (Energy Cost) فرآیندهای کاهش CO_2 ، به‌ویژه الکتروشیمیایی و فوتوکاتالیستی، نیازمند ورودی انرژی قابل توجهی هستند. اگر این انرژی از منابع فسیلی تأمین شود، مزیت زیست‌محیطی فرآیند از بین می‌رود. بنابراین، ادغام با منابع تجدیدپذیر (خورشیدی، بادی) ضروری است، اما ناپایداری و متناوب بودن این منابع هزینه‌ی ذخیره‌سازی و مدیریت شبکه را افزایش می‌دهد. [12]
۲. هزینه مواد و کاتالیست‌ها: (Catalyst & Material Cost) فلزات نجیب مانند Au، Ag و Ru فعالیت بالایی دارند اما هزینه‌ی آن‌ها مانع استفاده‌ی گسترده می‌شود. حتی فلزات ارزان‌تر مانند Ni و Cu نیز در مقیاس صنعتی نیازمند پشتیبان‌های پایدار و فرآیندهای سنتز پیچیده هستند که هزینه‌ی تولید را افزایش می‌دهد [۸]. طراحی کاتالیست‌های تک‌اتمی با بارگذاری کم فلز یکی از راهکارهای کاهش هزینه است. [19]
۳. زیرساخت و مقیاس‌پذیری: (Infrastructure & Scale-up) توسعه‌ی راکتورهای صنعتی برای فرآیندهای نوین مانند الکتروشیمی یا پلاسما نیازمند سرمایه‌گذاری سنگین در زیرساخت‌هاست. علاوه بر این، مقیاس‌پذیری فرآیندها با مشکلاتی مانند افت فشار، مدیریت حرارت و یکنواختی جریان مواجه است. [11,22]
۴. بازار و سیاست‌گذاری: (Market & Policy) حتی اگر فناوری از نظر علمی و اقتصادی آماده باشد، پذیرش بازار و سیاست‌های حمایتی نقش کلیدی دارند. قیمت پایین سوخت‌های فسیلی و نبود مشوق‌های مالی برای کاهش CO_2 مانع تجاری‌سازی سریع می‌شود. سیاست‌های کربن‌زدایی و مالیات بر انتشار CO_2 می‌توانند انگیزه‌ی اقتصادی لازم را ایجاد کنند. [12,19]



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

۵. چشم‌انداز آینده: تحقیقات نشان می‌دهند که ترکیب فناوری‌های نوین با سیاست‌های حمایتی و کاهش هزینه‌ی انرژی می‌تواند مسیر تجاری‌سازی را هموار کند. توسعه‌ی راکتورهای مدولار، استفاده از انرژی تجدیدپذیر و طراحی کاتالیست‌های پایدارتر از جمله راهکارهای کلیدی برای آینده هستند. [19,22]

۴.۵. چشم‌اندازهای آینده

با وجود چالش‌های ترمودینامیکی، سینتیکی، مواد و اقتصادی، مسیرهای آینده‌ی تحقیق و توسعه در زمینه‌ی تبدیل CO_2 روشن و امیدوارکننده‌اند. پیشرفت‌های اخیر نشان می‌دهند که ترکیب دانش بنیادی با نوآوری‌های فناورانه می‌تواند راه‌حل‌های پایدار و مقیاس‌پذیر برای کاهش CO_2 فراهم سازد.

۱. مواد و کاتالیست‌ها:

- توسعه‌ی کاتالیست‌های تک‌اتمی (SACs) با گزینش‌پذیری بالا و بارگذاری کم فلز [19]
- استفاده از مواد دوبعدی مانند گرافن، MXene و نانوساختارهای پایدار برای افزایش سطح فعال و کنترل انرژی جذب واسطه‌ها [8]

- طراحی هیبریدهای فلز-اکسید و فلز-پلیمر برای ترکیب خواص اسیدی-بازی و الکترونی

۲. طراحی راکتور:

- توسعه‌ی راکتورهای مدولار و جریان پیوسته برای افزایش مقیاس‌پذیری [19]
- استفاده از راکتورهای فعال‌سازی دینامیکی (DAR) برای بازسازی مداوم سطح کاتالیست و افزایش گزینش‌پذیری [22]

- ترکیب پلاسما-کاتالیست برای فعال‌سازی CO_2 در شرایط محیطی [10]

۳. ادغام با انرژی تجدیدپذیر:

- اتصال مستقیم فرآیندهای الکتروشیمیایی و فوتوکاتالیستی به منابع خورشیدی و بادی [12]
- توسعه‌ی سیستم‌های ذخیره‌سازی انرژی برای مدیریت ناپایداری منابع تجدیدپذیر
- طراحی چرخه‌های ترکیبی (Power-to-X) برای تبدیل CO_2 به سوخت‌های مایع و جامد با ارزش افزوده بالا

۴. تحلیل‌های چندمقیاسی و مدل‌سازی:

- ترکیب DFT با دینامیک مولکولی و CFD برای پیش‌بینی عملکرد کاتالیست‌ها و راکتورها [13]
- استفاده از یادگیری ماشین و هوش مصنوعی برای کشف مواد جدید و بهینه‌سازی شرایط واکنشی

۵. سیاست‌گذاری و تجاری‌سازی:

- ایجاد مشوق‌های مالی و سیاست‌های کربن‌زدایی برای حمایت از فناوری‌های نوین [19]
- همکاری‌های بین‌المللی برای توسعه‌ی زیرساخت‌های صنعتی و کاهش هزینه‌ها
- تمرکز بر اقتصاد چرخه‌ای و استفاده‌ی مجدد از CO_2 به عنوان منبع کربن پایدار

۵. نتیجه‌گیری



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

تبدیل دی‌اکسید کربن (CO_2) به محصولات ارزشمند یکی از چالش‌های بزرگ و در عین حال فرصت‌های مهم در حوزه‌ی شیمی پایدار و انرژی تجدیدپذیر است. همان‌طور که در این مرور نشان داده شد، مسیرهای مختلفی برای فعال‌سازی و کاهش CO_2 وجود دارند؛ از فرآیندهای سنتی حرارتی مانند هیدروژناسیون و واکنش ساباتیو [11,10] گرفته تا رویکردهای نوین فوتوکاتالیستی، الکتروشیمیایی و پلاسما-کاتالیستی [12,8,22]. در سطح بنیادی، پایداری ترمودینامیکی و موانع سینتیکی بالا همچنان مانع اصلی در فعال‌سازی CO_2 هستند. [21] طراحی کاتالیست‌های نوین با توانایی کنترل انرژی جذب واسطه‌ها و افزایش گزینش‌پذیری به سمت محصولات چندکربنه، کلید غلبه بر این محدودیت‌هاست [19].

از منظر فناوریانه، توسعه‌ی راکتورهای ساختاریافته، مدولار و فعال‌سازی دینامیکی می‌تواند مقیاس‌پذیری و راندمان فرآیندها را افزایش دهد [22]. ادغام این فناوری‌ها با منابع انرژی تجدیدپذیر، مسیر آینده‌ی کاهش CO_2 را به سمت اقتصاد چرخه‌ای و تولید سوخت‌های پایدار هدایت خواهد کرد [12,19].

از دیدگاه اقتصادی و سیاست‌گذاری، کاهش هزینه‌ی انرژی و مواد، همراه با مشوق‌های مالی و قوانین کربن‌زدایی، برای تجاری‌سازی این فناوری‌ها ضروری است [19]. تنها با ترکیب نوآوری‌های علمی، مهندسی پیشرفته و حمایت‌های اقتصادی-سیاسی می‌توان به کاهش واقعی انتشار CO_2 و دستیابی به اهداف اقلیمی جهانی امیدوار بود.

به‌طور خلاصه، آینده‌ی تبدیل کاتالیزوری CO_2 در گرو سه محور کلیدی است:

- نوآوری در طراحی مواد و کاتالیست‌ها
- توسعه‌ی راکتورهای کارآمد و مقیاس‌پذیر
- ادغام با انرژی تجدیدپذیر و حمایت‌سیاستی

این مرور نشان می‌دهد که اگرچه مسیر پیش‌رو پرچالش است، اما چشم‌اندازهای علمی و صنعتی روشن هستند و می‌توانند نقش مهمی در گذار به اقتصاد کم‌کربن ایفا کنند.



مراجع

1. Leonzio C, et al. *Electrochemical reduction of CO₂: Advances and perspectives*. Chem Eng Res Des. 2024.
2. Li X, et al. *Photoconversion of CO₂: Catalytic strategies*. Catalysis Today. 2014.
3. Lee J, et al. *Biomass and plastics conversion*. Chem Sci. 2024.
4. Han J, et al. *Electrochemical CO₂ reduction challenges*. Chem Sci. 2024.
5. Barcelos A, et al. *Electrocatalyst materials*. Brazilian Journal. 2024.
6. Li Y, et al. *MOFs for CO₂ reduction*. Sci China Mater. 2025.
7. Li Y, et al. *Acylamide MOF for CO₂ reduction*. J Mater Chem A. 2024.
8. [Authors]. *Recent advances in CO₂ conversion*. RSC Advances. 2022.
9. Kumar B, et al. *CO₂ conversion commercialization pathways*. Environ Sci Technol Lett. 2024.
10. Álvarez A, et al. *CO₂ activation over catalytic surfaces*. ChemPhysChem. 2017.
11. Navarro JC, et al. *Policies and motivations for CO₂ valorization via Sabatier reaction*. Catalysts. 2018.
12. Varhade S, et al. *Electrochemical CO₂ reduction: Commercial innovations*. ChemElectroChem. 2025.
13. Gholizadeh R, et al. *Multiscale modeling of CO₂ reduction on copper catalysts*. ChemSusChem. 2025.
14. Alkhuzai KA, et al. *Role of electrocatalysts in CO₂ conversion to C₂+ products*. Catalysts. 2024.
15. Sikdar N. *Strategic catalyst design for selective liquid products in CO₂ reduction*. Chem Eur J. 2024.
16. Shi X, et al. *Challenges and opportunities in electrocatalytic CO₂ reduction*. Angew Chem Int Ed. 2022.
17. Ye Z, et al. *MOF-based catalysts for thermal hydrogenation of CO₂ to HCOOH*. Catalysts. 2024.



دانشجویان علوم پایه ایران

4th International Conference of
Iranian Basic Science Students

18. Chen C, et al. *Single-atom catalysts for CO₂ electroreduction*. EES Catalysis. 2024.
19. Franco F, et al. *Transition metal catalysts for CO₂ reduction*. Chem Soc Rev. 2020.
20. Zhang J, et al. *Dynamic activation catalysts for CO₂ hydrogenation*. Nat Commun. 2025.
21. Chang X, et al. *Ceria in CO₂ conversion*. ACS Catalysis. 2020.
22. Masood Z, Ge Q. *DFT studies on metalloporphyrin catalysts for CO₂ reduction*. Molecules. 2019.