
大连化物所等揭示高密度单原子Pd基选择加氢催化剂的稳定机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10837.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院大连化学物理研究所副研究员刘岳峰团队，研究员王爱琴、中科院院士张涛团队，与法国斯特拉斯堡大学、德国马普协会化学能源转化研究所、四川大学等合作，在阐明碳化钼（ γ -MoC）负载高密度单原子Pd基催化剂的稳定机制、选择加氢反应中的独特催化性能研究方面获进展。

单原子催化剂（SAC）具有独特的几何和电子结构，在选择加氢反应中显示出优异的活性和选择性。由于单个金属原子与载体的直接化学键合，SAC性能在很大程度上取决于所用载体性质。在相对较高温下，将单原子催化剂暴露于还原性气氛中，这种金属-氧络合物将被破坏，导致单个原子的聚集/烧结，失去其化学选择性。因此，获得高稳定、高密度单原子选择加氢催化剂，特别是较高反应温度下仍保持原子级分散的催化剂具有挑战性。

研究人员利用配备原位样品台的球差校正扫描透射电子显微镜（AC-STEM）在常压（1bar）、20%CH₄/H₂

混合碳化气氛中原位观测高负载量（质量百分含量至5wt%）的Pd纳米粒子从纳米粒子至原子级分散的动力学过程，并结合原位谱学技术（包括NAP-XPS和准原位XAS）和理论计算（DFT），确定在原位碳化过程中Pd原子倾向于迁移到富含空位的碳化钼表面，形成高密度、表面富集的单原子分散的Pd₁/γ-MoC催化剂。研究人员将Pd₁/γ-

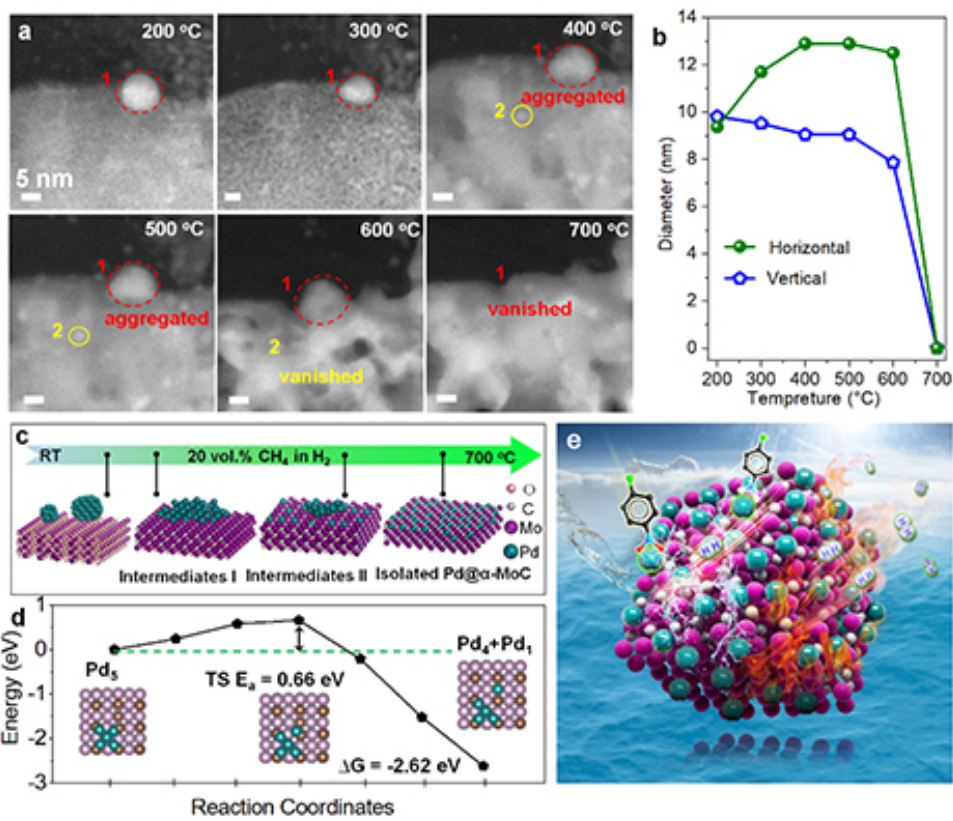
MoC催化剂应用到芳香硝基化合物的液相选择加氢和富氢条件下逆水煤气反应（RWGS，CO₂ + 3H₂ → CO + 2H₂ +

H₂

O₂）中，其均表现出优异的活性和选择性，远优于Pd纳米颗粒催化剂；该催化剂可承受高达400 °C的还原/反应气氛，且没有单原子的聚集。该研究为寻求在苛刻的还原条件和高密度条件下仍具有优异选择性和稳定性的单原子催化剂提供了新途径。

相关研究成果发表在《德国应用化学》（[Angew. Chem. Int. Ed.](#)

）上。研究工作得到国家自然科学基金项目、中科院战略性先导科技专项（B类）“能源化学转化的本质与调控”、国家重点研发计划、辽宁省“兴辽英才计划”项目和中科院青年创新促进会等的资助。



大连化物所揭示高密度单原子Pd基选择加氢催化剂的稳定机制

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发