
大连化物所构筑MSUB29SUB团簇模型催化剂

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11456.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研究员李杲与首都师范大学教授万重庆、芬兰于韦斯屈莱大学教授Hannu

Hakkinen合作，构筑双金属团簇模型催化剂 $Au_{13}Ag_{16}L_{24}$

，通过单晶衍射技术和DFT理论计算，揭示该团簇的晶体结构和电子结构，探索该团簇模型催化剂在 A^3 -偶合反应中的应用。

精准原子组成的金属团簇作为一种新型的纳米材料表现出独特的理化性质，在基础理论研究（新型模型催化剂）以及发光、催化、生物制药、传感、生物标记等领域的应用方面具有重要价值。

李杲团队致力于金属团簇合成和催化的研究（*Chemical Reviews*, 2020；*The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2020；*Journal of Materials Chemistry A*, 2020；*ACS Catalysis*, 2017；*ACS Catalysis*, 2017；*ACS Nano*, 2016；*ACS Catalysis*, 2016；*Journal of the American Chemical Society*,

2015)。此次研究构筑 $Au_{13}Ag_{16}L_{24}$

合金团簇催化剂，该团簇由一个 $AuAg_{12}$ 内核和其外部四个 $AgAu_3$

结构单元组成，24个炔基配体组成12个“L-(Agcap)-Au-(Agicosa)-L”结构包覆在团簇表面。该研究通过理论计算结合超分子轨道理论，建立 $Au_{13}Ag_{16}$

团簇的

电子能级和光

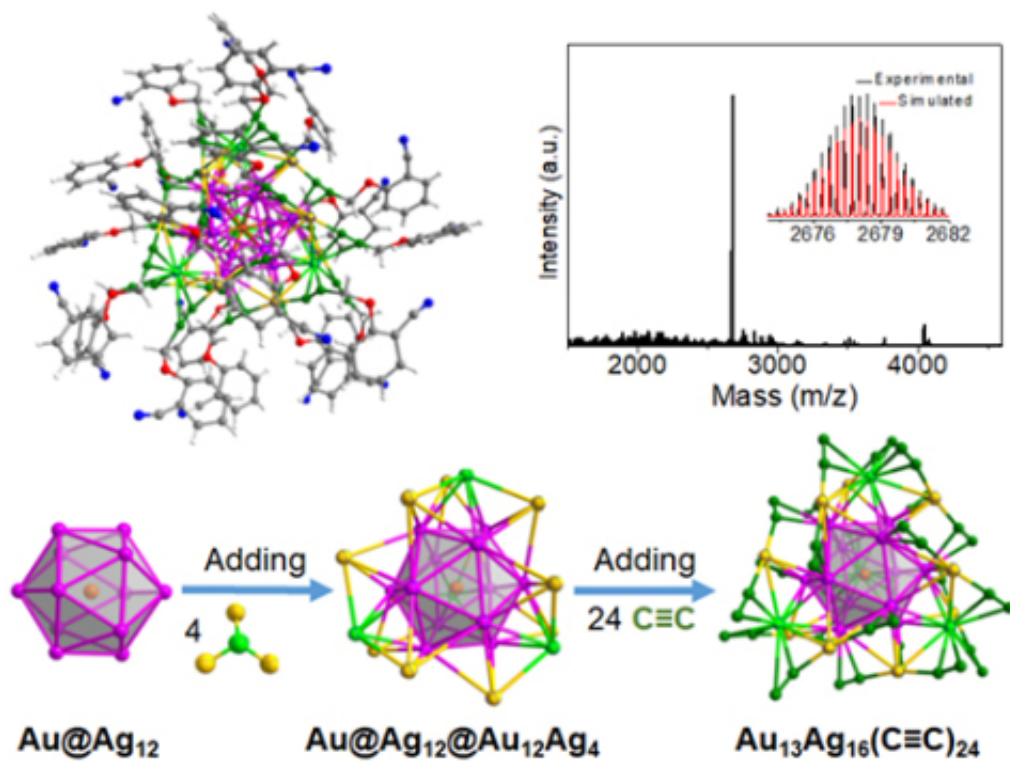
谱学特性间的对应关系。此

外，研究人员还探索团簇模型催化剂在 A^3

-偶合反应中的应用。研究成果为金属团簇合成提供方法和依据，为揭示团簇催化剂在催化反应中的作用机制和机理提供实践基础和理论指导。

相关研究成果发表在《德国应用化学》（[Angewandte Chemie International Edition](#)

）上。研究工作得到大连化物所煤代油基金、辽宁省“兴辽英才计划”、国家自然科学基金委等的资助。



大连化物所构筑M₂₉团簇模型催化剂

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