
我国科学家建立纳米催化剂抗烧结稳定性理论

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/16449.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！

我国科学家建立纳米催化剂抗烧结稳定性理论。

中国科学技术大学李微雪教授团队经过8年攻关，结合大数据与第一性原理，提出并建立纳米催化剂生长动力学的一般性理论，为理性设计和筛选实际使用条件下稳定、抗烧结纳米催化剂奠定了重要科学基础。相关研究成果11月5日发表于《科学》。

对于工业实践来说，纳米催化剂的稳定性问题正成为产业化的瓶颈，它是实现高效化工生产、能源和环境催化以及双碳目标实现过程中生死攸关的问题。全球每年以热致或化学诱导的纳米催化剂的尺寸生长团聚为代表的工业催化剂失活，引起的替换或再生成本达数百亿元人民币。贵金属催化剂日渐攀高的需求，进一步加剧延缓其失活的迫切性。目前，纳米催化剂稳定性的预测理论和一般性原理研究仍然处于起步阶段，导致长达数年昂贵的催化剂寿命试错实验不可避免，并极大延迟高活性纳米催化剂的工业转化。因此，实现稳健纳米催化剂的理性设计，对纳米催化领域具有重要的科学和经济价值。

李微雪教授与团队成员胡素磊博士通过将大数据与第一性原理结合，以热致或化学诱导纳米催化剂烧结生长动力学作为突破口，积极探索控制纳米材料生长的基本原理，以理论计算的研究方法来分析金属纳米催化剂中金属与载体的相互作用关系，以原子吸附能、纳米粒子粘附能为标度，从理论层面建立起相互作用与稳定性之间的关系，即金属纳米催化剂与载体的相互作用既不能太强，否则会导致以奥斯特瓦尔德熟化的方式失活；也不能太弱，否则会导致以粒子迁移与碰撞的机制失活；只有相互作用适中时，金属纳米催化剂的稳定性达到最优。

在此基础上，他们还提出并发展了利用双功能载体打破标度关系限制的高通量筛选策略，为实现超稳定纳米催化剂的设计和预测提供了可能。（来源：中国科学报 桂运安）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1126/science.abi9828>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：李微雪等 来源：《科学》

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](https://www.iikx.com)转发