贵金属碳化物与氧碳化物结构相似

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/17004.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！

贵金属碳化物与氧碳化物结构相似。近日，中科院大连化学物理研究所研究员江凌、副研究员谢华团队，与山西师范大学副教授刘志凌团队合作，发现贵金属碳化物与氧碳化物键合结构的相似性，为贵金属碳化物的结构预测和新型材料的理性设计提供了新思路。相关成果发表于《物理化学快报》。

贵金属作为催化剂具有无可比拟的优势，但是贵金属由于受到相对论效应的影响，使得贵金属催化剂的具体结构和反应机理很难被解释清楚。因此，亟需一种简单有效的模型去预测贵金属催化剂的结构。此前，科学家曾提出铂和氧之间在局部杂化轨道方面的相似性经验模型，还利用此模型发现PtC3分子稳定的线性结构。

此次，科研人员利用自主研制的双通道飞行时间质谱与光电子成像谱联用的实验装置，发现贵金属碳化物 铱—三碳、铂—三碳、金—三碳键合结构和电子态的相似性，证明这三种团簇互为等电子体，同时还发现氧—三碳与上述等电子体键合结构的相似性。该研究为预测贵金属碳化物的结构提供了有效模型，为新型催化剂的合成设计提供了新策略。（来源：中国科学报 卜叶）

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.1c03754

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：江凌等 来源：《物理化学快报》

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转发