实现在单个金属粒子催化活性位的结构调控

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/19749.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！

实现在单个金属粒子催化活性位的结构调控。近日，中科院大连化学物理研究所催化基础国家重点实验室研究员李勇、研究员申文杰等与德国卡尔斯鲁厄理工学院汪跃民教授、上海应用物理研究所研究员姜政、中国科技大学李微雪教授等合作，在单个金属合金粒子催化加氢研究方面取得新进展。相关研究成果发表在《自然—通讯》。

双金属合金催化剂具有可变的化学组成、可调的几何结构和迥异的电子分布特性，广泛应用于石油化工、精细化学品合成等领域。但是，在催化反应条件下合金粒子之间的金属原子迁移和扩散导致催化剂纳米粒子重构，以及表面化学组成、粒子尺寸、形貌、晶相等发生变化。因此，定量描述金属合金催化剂活性位原子结构是多相催化领域所面临的挑战。

本工作中，研究团队首先利用多元醇液相还原技术制备了单分散的PdCu纳米粒子（8nm），再利用反相微乳液法制备了SiO2包裹的PdCu@SiO2核壳型结构的单个粒子，最后，通过调节处理温度和气氛，在化学组成、尺寸和形貌不变的前提下，在SiO2壳层限域的纳米空间内实现了单一合金纳米粒子从有序体心立方（B2）到无序面心立方（fcc）的晶相转变。研究发现，在室温和计量比条件下的乙炔催化加氢反应中，B2粒子的转化速率是fcc粒子的十倍以上。此外，研究团队借助同步辐射、红外光谱、原位电镜和理论计算等，发现B2粒子的Pd和Cu原子分别有序占据体心立方的顶点和体心位置，而fcc粒子中的Pd和Cu原子随机落位于面心立方的顶点和面心位置；B2粒子表面具有高密度的Pd-Cu键，高度隔离的Pd位点可以活化H2分子，解离的H原子则落位在粒子表层和次表层的Pd和Cu原子间隙，表现出更高的催化加氢本征活性。

本工作不仅揭示了单个金属纳米粒子活性位的原子结构，更为重要的是，为研究单个粒子催化行为和研制高活性金属合金催化剂提供了新思路和理论基础。（来源：中国科学报孙丹宁）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41467-022-32274-4

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：李勇等 来源：《自然—通讯》

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