

---

# 揭示单原子驱动载体表面动态碳化新机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/20676.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！*

**揭示单原子驱动载体表面动态碳化新机制。**近日，中国科学院大连化学物理研究所张涛院士、副研究员杨冰团队，与上海高等研究院研究员朱倍恩合作，在单原子催化剂动态催化机制研究方面取得新进展。团队发现单原子不仅提供活性位点，同时还可以在长时反应过程中诱导载体表面碳化，进而大幅提升反应活性。相关成果发表于《化学》Chem上。

自2011年张涛等首次提出单原子催化概念以来，单原子催化剂(SACs)由于其特殊的活性、选择性以及原子利用率最大化等特点，逐渐成为催化领域的研究热点。尽管已有工作揭示了单原子位点对反应物活化、产物选择性的重要催化作用，但是，SACs在实际反应过程中的动态结构演变的识别与调控仍有待进一步探索。

本工作中，研究人员发现单原子催化剂(Pd1-FeOx)在二氧化碳加氢反应过程中的长时诱导期，可促进CO<sub>2</sub>转化率从17%逐渐增加到28%，并保持98%以上的CO选择性。相比而言，负载型纳米颗粒催化剂(Pd-NPs-FeOx)则一直保持稳定的催化活性和选择性。进一步通过原位表征、结构分析和理论计算等手段发现，Pd单原子不仅可以在反应初期提供高效的催化活性位，同时在长时反应过程中还可以促进FeOx载体的动态碳化，获得高活性的Fe<sub>5</sub>C<sub>2</sub>活性相，从而显著提高CO<sub>2</sub>转化率并降低活化能至27.7kJ/mol。相比之下，Pd纳米颗粒与载体(FeOx)则发生强金属载体相互作用(SMSI)，产生的FeOx包覆抑制了FeOx的深度还原与碳化。

本研究加深了对单原子催化的理解，揭示了反应环境下单原子位点对载体结构的动态作用机制，为单原子催化剂界面结构设计提供了新的启发。(来源：中国科学报孙丹宁)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.chempr.2022.08.012>

作者：张涛等 来源：《化学》

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