
合肥研究院在非金属杂原子掺杂调控催化性能研究方面取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/22537.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！

合肥研究院在非金属杂原子掺杂调控催化性能研究方面取得进展

。近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究团队在非金属杂原子掺杂调控催化性能的研究中取得进展，合成了N、P共掺杂碳包覆的钴基催化剂(Co@NPC)，探究了催化剂中杂原子掺杂对肉桂醛选择性加氢的影响，相关研究成果发表在Journal of Catalysis上。

非金属原子掺杂碳载体负载的金属纳米颗粒非均相催化剂在催化加氢反应中展现出较好的催化活性。与金属原子相比，非金属原子具有更大的电负性，非金属杂原子的引入可以有效地改变原材料的电子结构和化学性质，产生丰富的活性位点从而提高催化性能，是催化领域具有潜力的材料。

鉴于此，研究人员制备了一种N、P共掺杂碳包覆钴基催化剂(Co@NPC)，并将其用于肉桂醛的水相加氢反应。研究发现，Co@NPC在反应中展现了良好的性能，在80 °C、0.5MPa氢压、5h的反应条件下可以实现92.1%的肉桂醛转化，对产物肉桂醇的选择性达79.7%。与未掺杂的催化剂Co@C相比，N、P的掺杂可以显著提高催化性能，并且能通过调节掺杂量来控制反应的活性和选择性。实验发现，P掺杂可以提高肉桂醇的选择性，而N掺杂与催化剂的催化活性密切相关。DFT理论计算结果表明，N、P和C原子之间的电负性差异导致了电子之间的相互作用，改变了催化剂中Co和CoO的比例，从而改变了肉桂醛在催化剂表面的吸附强度，根据吸附能的差异可以对反应产物进行调节。该工作表明非金属原子的掺杂使催化剂电子结构的调节具有更多可能性，为生物衍生选择性加氢反应催化剂的设计提供了新思路。

上述工作得到国家自然科学基金的支持。

[论文链接](#)

图1 Co@NPC的(a)合成示意图、(b-c) SEM图、(d) TEM图、(e) HRTEM图 图2
Co@NPC反应性能：转化率及选择性随(a)溶剂、(b)温度、(c)氢压、(d)时间变化图 图3 (a)
Co@C、Co@NC和Co@NPC的催化性能;(b) 三种不同催化剂的XRD图谱;(c)
Co@NPC计算模型侧视图和俯视图;(d) Co@NPC催化剂的电荷密度差图;(e)
催化剂中的电子转移途径;(f) Co表面和(g) CoO表面吸附肉桂醛的示意图

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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