
用数学思维解决催化难题！“孤立度”描述符设计单位点合金催化剂

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/22573.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！

用数学思维解决催化难题！“孤立度”描述符设计单位点合金催化剂。

2023年3月27日，天津大学巩金龙教授研究团队在Nature Nanotechnology期刊上发表题为Designing single-site alloy catalysts using a degree-of-isolation descriptor的研究成果。

该研究从理论计算出发，综合考虑了合金的电子和几何调控，成功在电子和几何两个方面量化了活性位点和吸附质之间的排斥作用，构建出微观环境描述符孤立度(degree-of-isolation)。孤立度能够直接预测丙烷脱氢反应中的丙烯选择性，为催化剂的理性设计提供了良好的示范。

论文通讯作者是巩金龙教授，第一作者是常鑫、赵志坚教授。

丙烯是重要的化工原料，不仅拥有多元化的生产工艺，也具有丰富的下游产业链条，在工业生产中作用巨大。丙烷脱氢(PDH)是目前最具前景的丙烯生产技术之一，近年来引起了广泛关注。然而，我国现有的PDH工艺主要依赖高价进口的成熟工艺包，作为工艺核心的催化剂被发达国家牢牢把持。尽管目前的研究已经开发了大量的丙烷脱氢催化剂，但是它们的性能仍有待提高。与传统的实验试错法相比，通过密度泛函理论(DFT)计算凝练具有预测能力的描述符可以加速催化剂的设计进程。然而，如何合理地阐释合金中催化位点的微观环境，并提炼出描述符与催化性能的直接关联，依然是巨大的挑战。

天津大学巩金龙教授团队提出了催化微环境预测催化性能的研究策略。这一方法的核心是定量阐释催化微环境，进而明确关联至催化性能的变化。考虑到催化环境受到几何和电子结构的影响，该研究具体采用了将这二者解耦，分别定量化描述的思路，以吸附质和活性位的排斥作用为纽带，利用简单的数学形式将这二者的定量描述耦合起来，从而凝练出微观环境描述符孤立度。只需输入催化剂的电子和几何结构参数，就能计算孤立度的数值，直接预测烯烃选择性，加速遴选性能优异的催化材料。在理论计算和实验上，孤立度和丙烯选择性均表现出火山型关系，揭示了单位点合金催化剂设计的Sabatier原理。这说明位点对吸附质的排斥作用不能太强也不宜过弱，而具有适中孤立度的催化剂将表现出最好的催化性能。

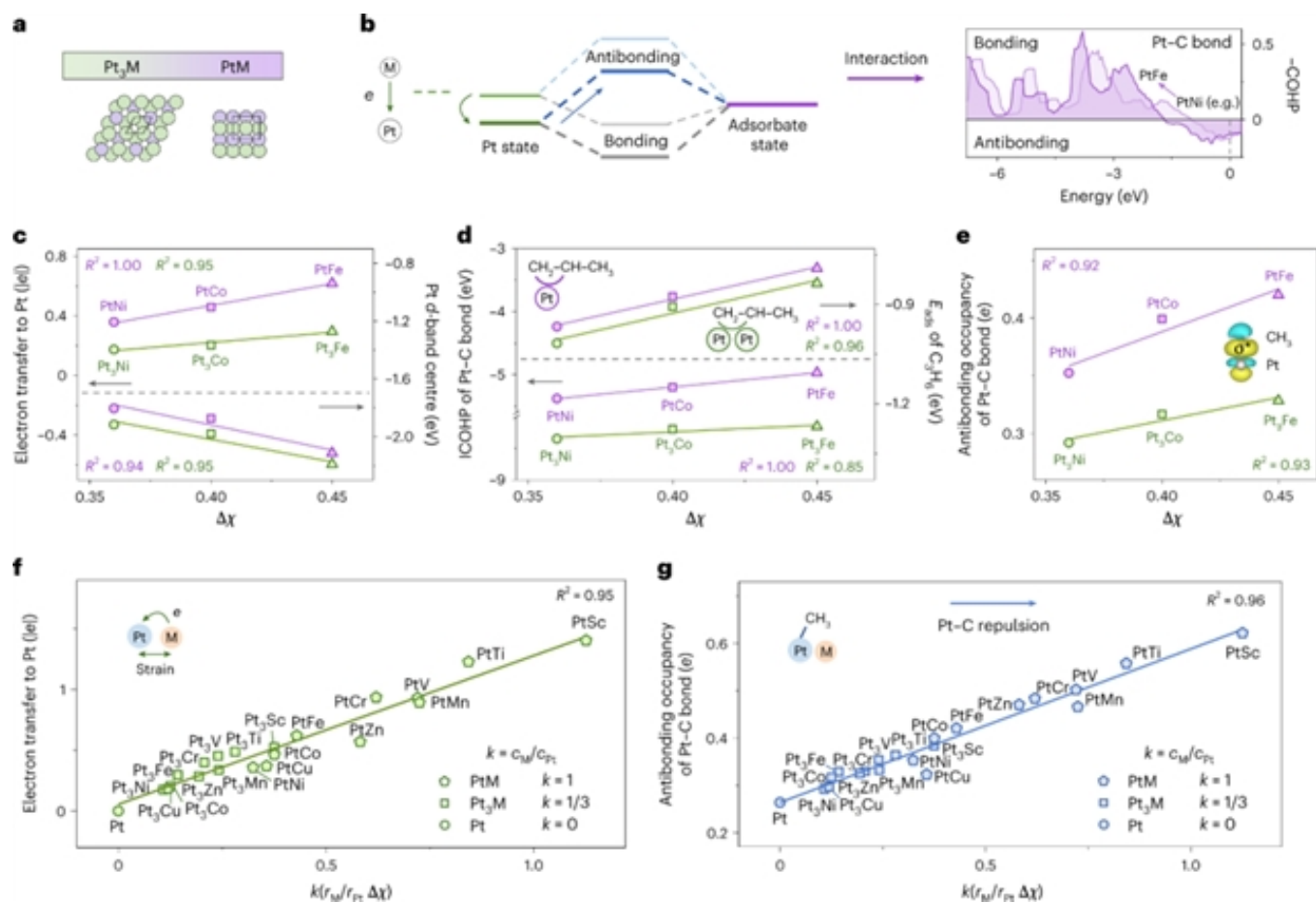


图1：活性位的电子调控

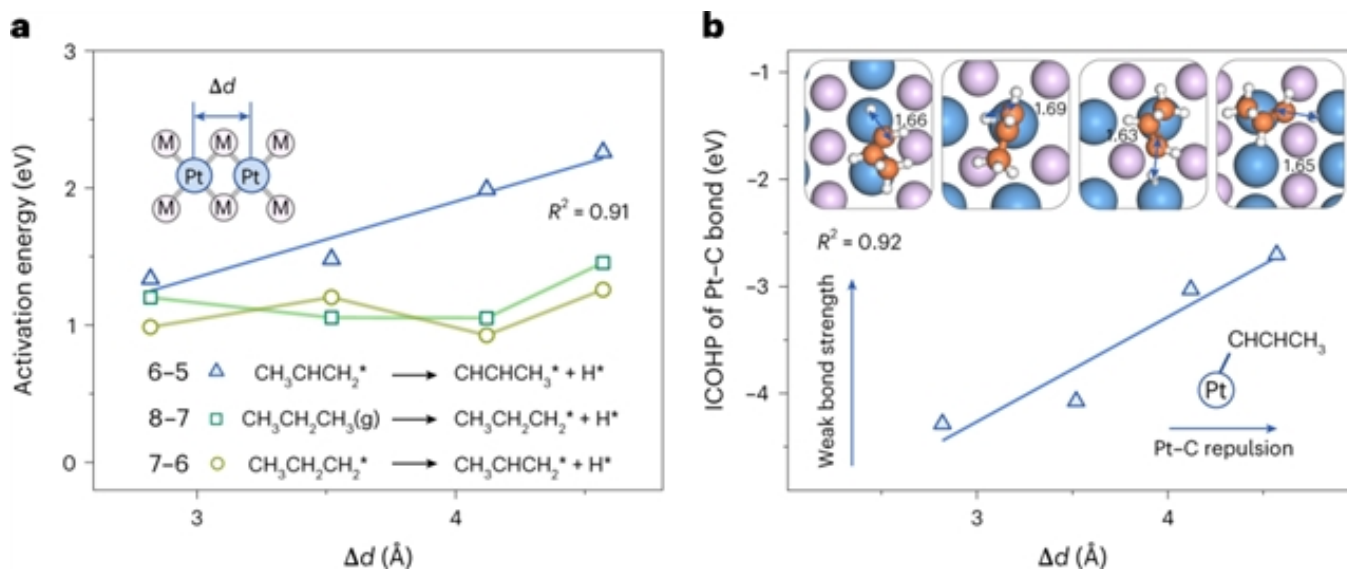


图2：活性位的几何调控

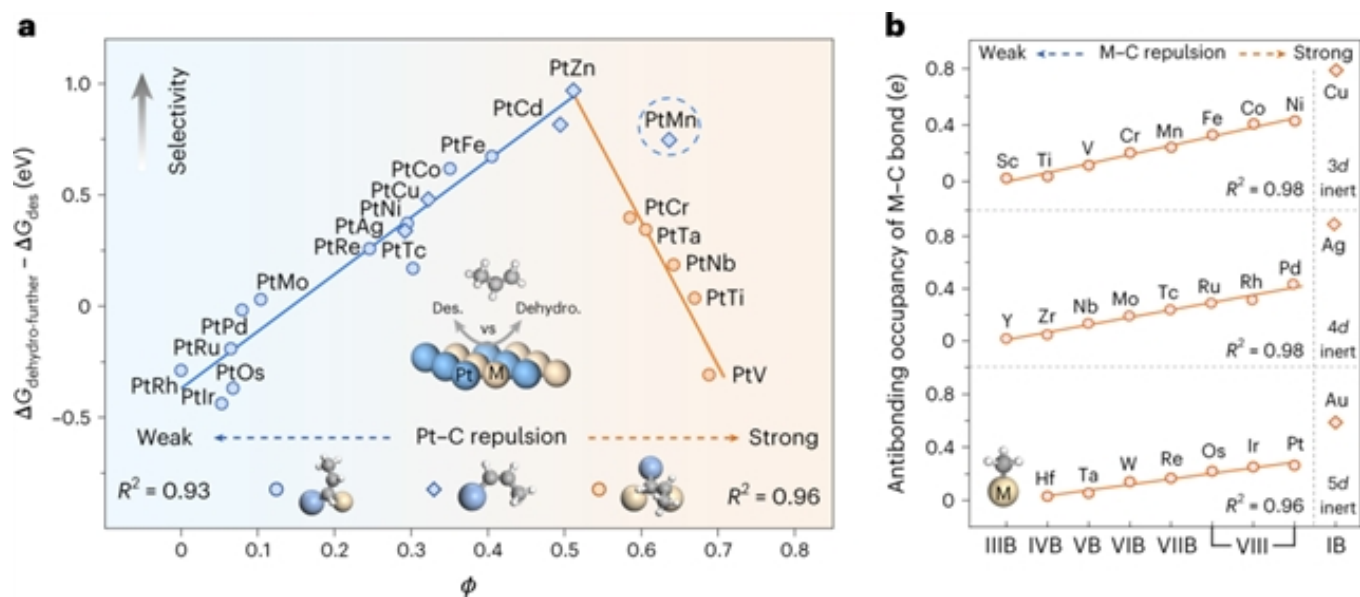


图3：孤立度与丙烯选择性的火山型关系

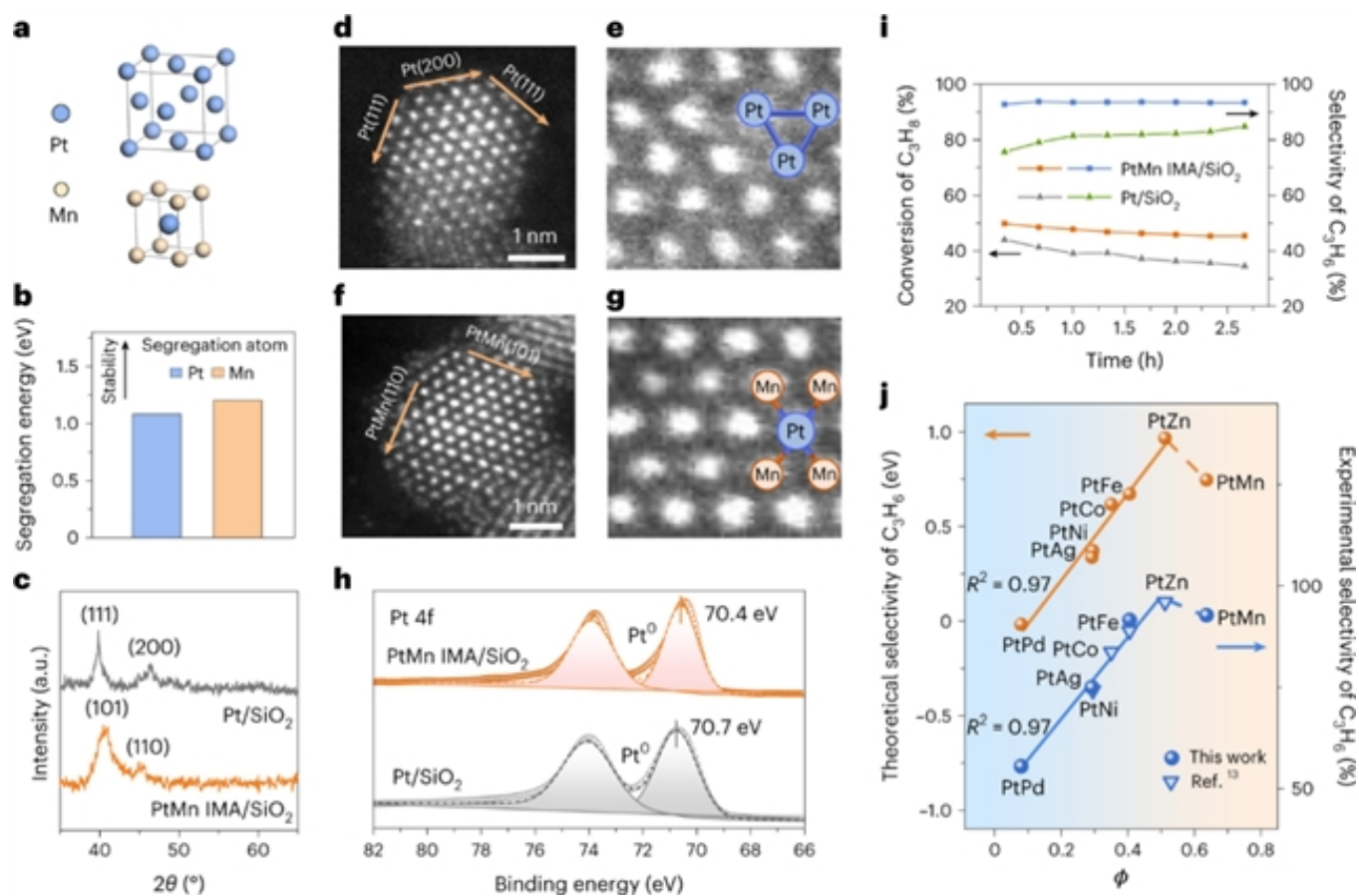


图4：实验验证

这项工作强调了描述和调控催化微环境的重要性，对推动催化剂从实验试错向理性设计转变具有重要意义。(来源：科学网)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41565-023-01344-z>

作者：巩金龙等 来源：《自然—纳米技术》

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