研究制备出金属-非金属置换式固溶体

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/31201.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！

研究制备出金属-非金属置换式固溶体。

研究置换式固溶体，可设计和优化金属材料及其他合金的性能，以满足不同的应用需求，在材料科学和工程领域具有重要意义。中国科学院过程工程研究所研究员杨军课题组用三正辛基膦（TOP）对预先形成的铂（Pt）纳米颗粒进行磷酸化，使得磷（P）原子能够取代处于晶体格点位置的部分Pt原子，形成Pt-P置换式固溶体。

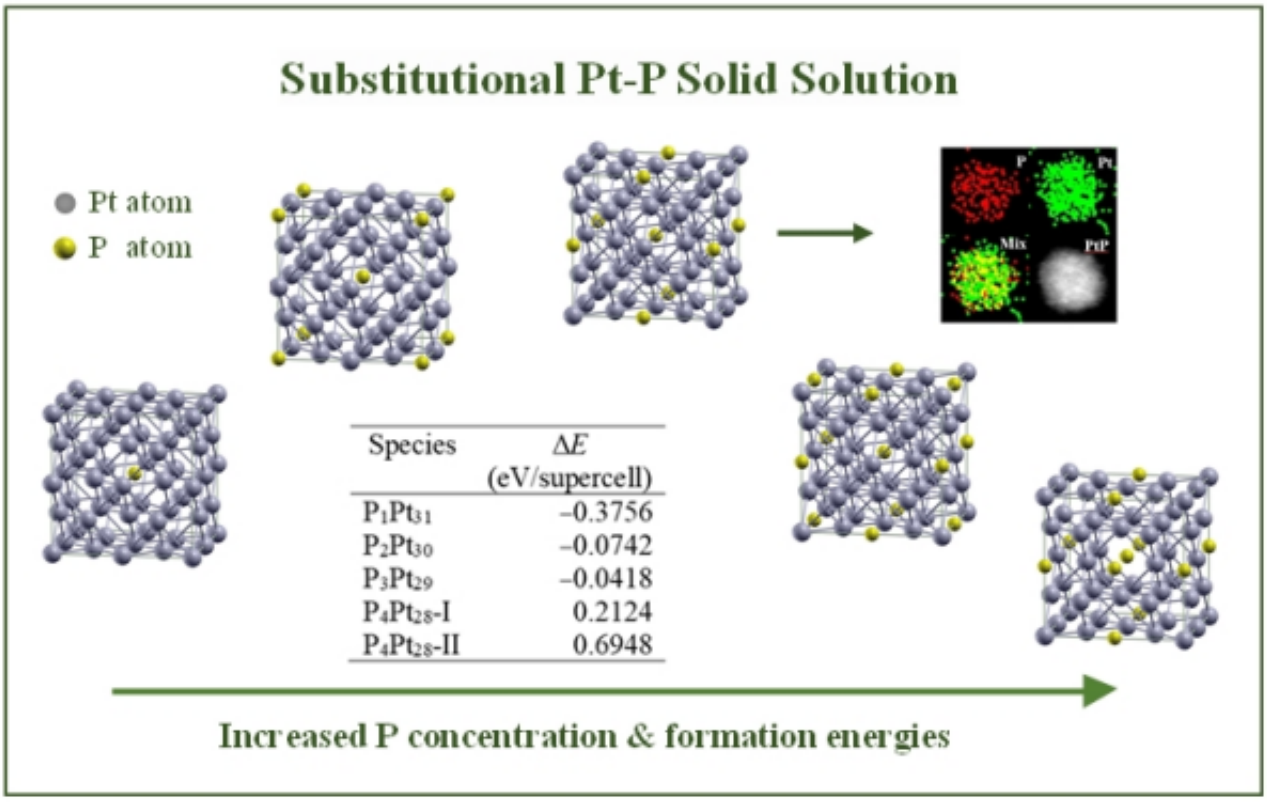
通常，P掺杂Pt形成的固溶体用来解决电化学反应中催化剂成本高和活性低等问题。由于金属和非金属在原子尺寸、晶体结构、电负性和成键方式等方面存在明显差异且互溶性较低，金属和非金属元素形成间隙固溶体即溶质原子嵌入溶剂或母体原子堆垛形成的间隙位置，难以形成置换式固溶体。对于Pt-P体系，它们形成置换式固溶体在晶体结构、原子大小和电负性角度似乎不违背休姆-罗瑟里规则。

该研究在十八烯和油胺混合溶剂中制备出虫子状Pt纳米颗粒，随后在高温下用TOP将其磷化。研究通过透射电子显微镜观察发现，磷化反应能够引起颗粒形貌的极大变化；磷化后的颗粒由虫子状变成直径约为4.8 nm完全球形的置换式固溶体，且该固溶体可由多种表征手段协同证实。理论计算表明，如果磷化后的固溶体能够维持稳定的面心立方结构，则P的掺杂上限约为10%。这与实验观察吻合，符合原子尺寸差异预示的有限固溶体。

研究发现，有限的P掺杂现象可以从材料科学基础理论上得到解释。由于原子尺寸的差异，P原子取代部分Pt原子必然在周围产生较大晶格畸变，引起系统内能增加；虽然P原子取代Pt原子增加了系统可能存在的状态数，引起熵变增加，但在较低的温度下，内能增加占主导，可能导致系统自由能增加。因此，P原子的取代应有一个上限，且在这个上限以下畸变导致的内能增加被控制在一定限度，使晶体结构能够保持稳定。

近日，相关研究成果发表在*Small*上。研究工作得到国家自然科学基金的支持。

论文链接



TOP磷化形成Pt-P置换式固溶合金

研究团队单位：过程工程研究所

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