

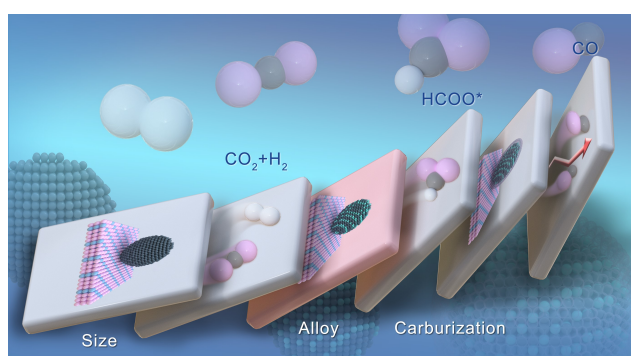
# 研究揭示催化剂结构演变与反应进程的“多米诺效应”

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/33778.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！

研究揭示催化剂结构演变与反应进程的“多米诺效应”。近日，中国科学院院士、中国科学院大连化学物理研究所研究员张涛，副研究员杨冰团队与中国科学院上海高等研究院研究员朱倍恩合作，在动态金属催化研究与设计方面取得新进展。研究团队通过原位解析不同尺寸的Pd/FeOx催化剂在二氧化碳加氢过程中的动态演变行为，揭示了催化剂结构演变与反应进程之间的多米诺效应，为催化剂的高效设计提供了新思路。相关成果发表在《美国化学会志》。



多米诺效应示意图。大连化物所供图

在多相催化领域中，动态碳化作为一种常见的催化剂重构过程，其关键调控因素的识别对催化剂性能优化至关重要。然而，在实际反应进程中，反应环境、反应中间体与催化剂结构演变之间存在错综复杂的耦合作用，这为原位解析高活性结构、实现催化剂的理性设计带来挑战。

在本工作中，研究团队发现，大颗粒5Pd-FeOx催化剂在反应初期受氢气主导，促进金属载体合金化产生Pd3Fe合金。该合金表面进一步促进HCOO\*反应中间体，导致快速表面碳化，形成高活性的Pd3Fe@Fe5C2/Fe3O4结构，展现出优异的逆水汽变换反应活性。相比之下，小尺寸的0.5Pd-FeOx催化剂由于强金属载体相互作用，FeOx包覆层抑制了Fe的还原和碳化过程，导致相对较低的反应活性。而0.05Pd-FeOx单原子催化剂则由于金属载体电子相互作用，促进二氧化碳直接解离，并在一氧化碳诱导下产生缓慢体相碳化。

这些结果揭示了催化剂动态结构演化的复杂性及其与反应进程、反应网络之间的交互耦合机制，

---

阐明了金属粒径 反应气 界面重构 反应中间体 动态碳化 反应产物的链式多米诺效应。通过解耦这一复杂动态过程，研究人员发现，相比于尺寸效应和金属-载体相互作用，合金化过程才是加速催化剂碳化从而提高反应活性的关键因素。基于这一认识，团队进一步设计出具备高活性、短诱导期的低载量0.5Pd3Fe/FeO<sub>x</sub>合金催化剂，提升了反应性能及贵金属利用率，实现了高性能二氧化碳加氢反应中催化剂的高效设计。

该研究强调了原位解耦催化剂复杂动态演变的重要性，为发展原位结构解析驱动的催化剂理性设计提供了范例。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.5c01435>

作者：张涛等 来源：《美国化学会志》

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