

---

# 费托合成铁基催化剂相变调控理论研究取得重要进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36469.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！*

费托合成铁基催化剂相变调控理论研究取得重要进展。

为实现高原子利用率和催化效率，工业催化剂的活性核心组分通常是纳米尺寸。理解催化剂纳米颗粒反应条件下的物相演化行为，对可持续能源技术中催化剂理性设计具有重要意义。铁基催化剂应用广泛，可用于合成气转化及CO<sub>2</sub>加氢等工业领域。但反应气氛下，铁基催化剂通常表现出复杂的物相演化行为，并伴随组分变化。多种碳化相的共存与转化，导致其动态反应条件下的结构稳定性与演化机理缺乏系统性认识，限制了催化材料的理性设计与性能优化。

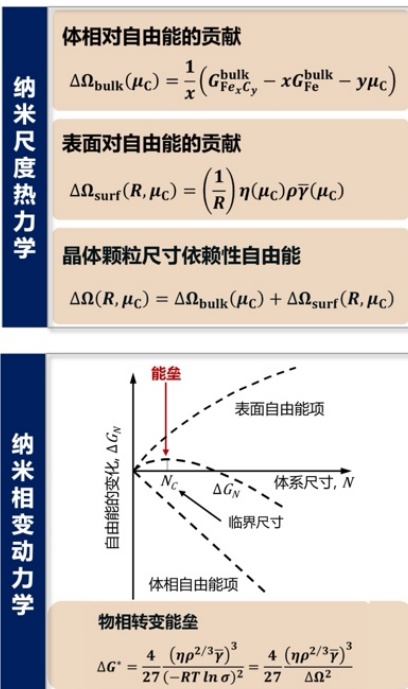
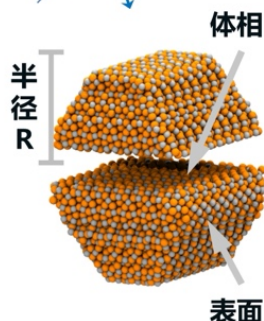
针对这一问题，中国科学院山西煤炭化学研究所基于碳化学势这一描述反应气氛的关键热力学变量，构建出综合考虑纳米尺度热力学与纳米相变动力学普适性理论框架，系统研究了反应条件、粒径和物相演化之间的复杂耦合关系。研究发现，纳米尺度效应在费托合成条件下，对碳化铁的物相选择性和演化路径具有决定性作用。基于该理论框架，研究团队解释了多相催化领域存在的疑问——在费托合成条件下  $\chi$ -Fe<sub>5</sub>C<sub>2</sub>相为何普遍占优而Fe<sub>7</sub>C<sub>3</sub>相极为罕见，该现象源于不同铁碳物相在纳米尺度下的热力学稳定性与动力学可达性差异。团队通过相变实验和各种先进表征技术对理论预测进行严格验证，实验结果与理论预测一致。

研究首次集成纳米尺度热力学理论和纳米相变动力学理论，解释化学组分可变的固体催化剂纳米颗粒在反应条件下的相变现象。这为高性能铁基催化剂的设计与优化奠定基础，也为预测和调控用于多种高效能源转化技术的复杂多元素纳米催化剂相行为建立普适性理论框架。

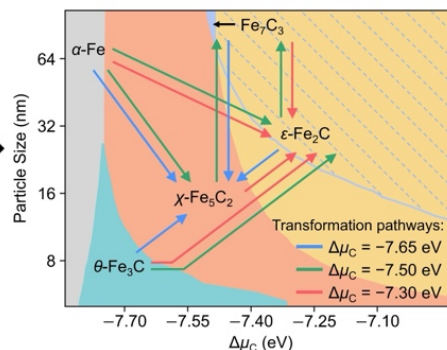
相关研究成果发表在《美国化学会志》（Journal of the American Chemical Society）上。研究工作得到国家自然科学基金委、中国科学院、科学技术部等的支持。

[论文链接](#)

费托合成反应气氛  
(碳化学势 $\mu$ )



纳米热力学+相变动力学综合相图



集成纳米尺度热力学信息与相变动力学信息的碳化铁纳米颗粒综合相图

研究团队单位：山西煤炭化学研究所

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](https://www.iikx.com)转发