

当前位置：首页 科学头条

浙大学者解密界面催化“黑匣子”，成果再登《科学》！

发布时间：2021-01-29 来源：浙大新闻办 作者：柯溢能 吴雅兰 卢绍庆

3037

最近更新

- 9月8日 浙江大学艺术博物馆开馆
- 1月8日 30年创新实践 开出“良方”
- 1月8日 慧眼辨良莠，“黄金”
- 1月8日 混凝土家族：高性能混凝土新成员
- 1月8日 做百姓用得、得起的好药
- 4月12日 浙江大学召开中心组党史学习教育专题学习会
- 4月12日 行读党史|浙大创新 用好课

图说浙大



樱花时节（二）

媒体浙大

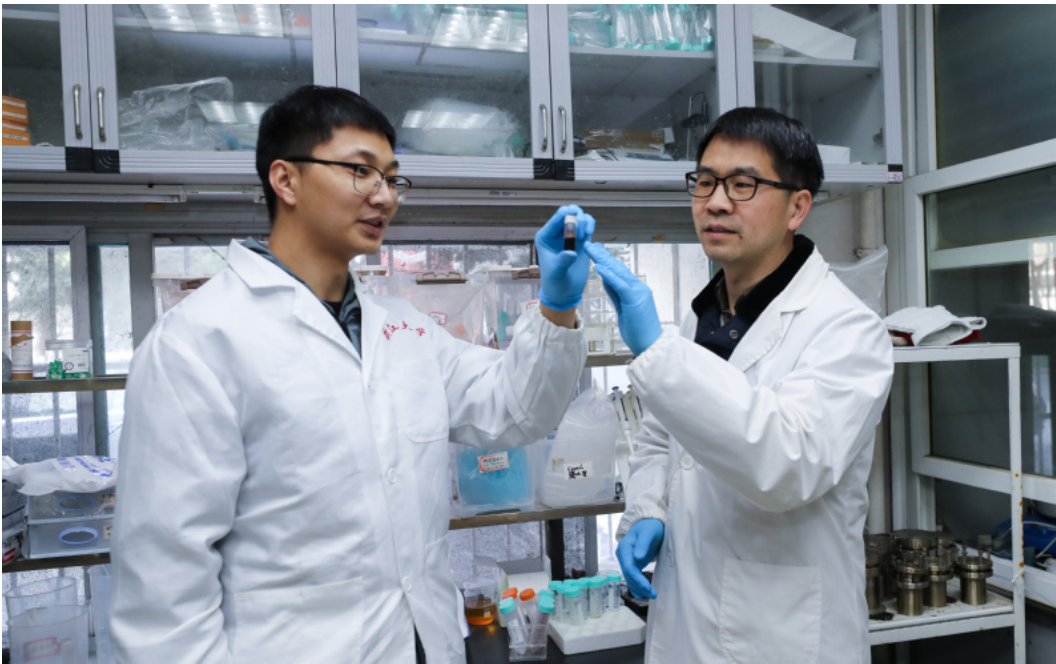
无需防护直面深海高压“软卡” 马里亚纳海沟

给植物贴“电子纹身” 浙大更喜欢夜里生长

科学家研制植物可穿戴茎节传感器

浙大“电子皮肤”看清植物生长 将为作物高产育种及栽培提供新工具

“电子纹身”监测植物茎节夜间生长





作为一种“尊贵”的象征，黄金在历史长河中一直以其化学惰性示人。但纳米尺寸的金颗粒与二氧化钛相结合后却性情大变，成了促进多种催化反应的高级主攻手。科学界普遍认为金与二氧化钛的界面是起到了关键作用的活性中心，但一直以来，研究人员未曾看到过真实催化过程中其活性界面原子级别的动态演变，因而无法进一步对其界面的活性进行精准调控。

打开这个催化反应“黑匣子”，看清楚催化过程如何发生是科学界长久以来的梦想。经过近五年的研究，浙江大学电子显微镜中心张泽院士团队的王勇教授联合中科院上海高等研究院高崑研究员、丹麦科技大学Wagner教授和Hansen博士等团队，在环境透射电子显微镜中，首次在原子尺度下一氧化碳催化氧化过程中观察到催化剂界面活性位点的可逆变化，并据此实现了界面活性位点的原子级别原位调控。这项成果对今后设计更好的环境催化剂、高效稳定地处理污染气体具有重要意义。

这项研究北京时间2021年1月29日，被国际顶级期刊《科学》在线刊登，这是该团队继2020年1月24日之后第二次在《科学》杂志上发表原位催化方向的学术论文。

电镜底下现原形

打开催化“机关”

负载在二氧化钛表面的金颗粒是将一氧化碳转化为二氧化碳的重要催化剂，也是工业催化研究中的常见组合。

浙大团队依托其擅长的原位环境电子显微学技术开展催化反应研究，在原子层面清楚地看到了整个催化过程。这个纳米催化剂长什么样呢？王勇介绍，金颗粒像一个磁体，牢固地贴在由二氧化钛制成的底座上。

科研人员首次发现两大现象：一是看到一氧化碳催化氧化时二氧化钛表面的金颗粒发生面内（外延）转动（约 9.5° ），首次通过可视化实验直观证实了界面是活性中心。二是从催化反应环境回到氧气环境时，金颗粒又神奇的转回到原来的位置。

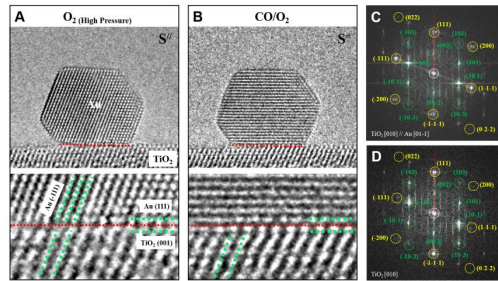


图1. 侧视视角观察金在二氧化钛表面的转动

这个过程就像武侠剧中，通过旋转机关打开隐避门一般，金属颗粒通过转动合适角度后可增加界面活性位点数量，从而提高催化效率。

看清“黑匣子”的难度在哪里？袁文涛介绍，高质量样品的制备、观察角度的选择、电子束的干扰都会影响实验的顺利开展。正如审稿人所说：“目前已有一系列工作报告纳米颗粒在不同气氛环境下发生可逆的结构变化，但在原子层次获取他们的结构演变细节仍是一个巨大的挑战。”

“要完成这个实验，需要制备原子级别平整的金-氧化钛界面。”王勇说，这样才能实现金颗粒的可控转动。此外，找准观察角度非常重要，一方面是能够看清晶格的排布，另一方是能够更好地描述现象。“一开始我们从侧面去观察，（对非专业人士来说）旋转不是很明显，开始审稿人不太相信，后来我们重新设计实验从顶上往下俯视，角度稍有一点变化，都能看得一清二楚。”审稿人肯定说：“所有这些都是利用原位电镜完成，他们把侧视图和俯视图观察到的信息关联起来，这真了不起。”

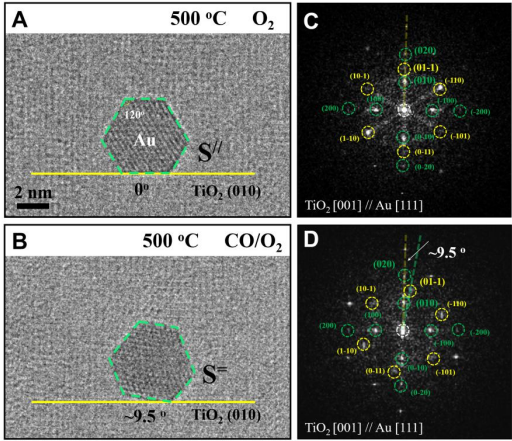


图2. 俯视视角观察金在二氧化钛表面的转动

还原事实真相

四两拨千斤

浙大科研团队这次看到的催化剂转动，一度被人们认为是不可能发生的现象，正如其中一个审稿人曾提到“整个颗粒的转动是难以置信的”。

这是因为金颗粒和二氧化钛结合在一起时形成了化学键，“焊接”非常牢固（有外延关系），即便是被高能量的电子束轰击也都岿然不动。

张泽解释，一样东西的存在要保持能量的最低状态，不同的环境中，物体所需最低能量也是不同的。这就好比，在低海拔地区需要100摄氏度才会沸腾的水，到了高海拔地区可能90摄氏度就沸腾了。

如何打破化合键的“定力”，让它动起来从而实现对界面的操控？

王勇说，用“蛮力”是行不通的。“这就需要用巧劲。氧气通入后喜欢吸附在金-二氧化钛界面处，可以把金颗粒‘托起来’。”王勇说，我们和高凝理论团队密切合作，结合一系列理论计算发现当实验中把一氧化碳通入与氧气发生催化反应，本质上是消耗了部分界面氧，“桩托”就不稳定了，这样四两拨千斤地把原来需要很大力气才能推动的金颗粒转动了；当我们停止通一氧化碳时，界面氧得到补充，金颗粒又转回原位了。

“这是非常有意思的发现，催化剂颗粒在反应前和反应后都处于同一位置，但在反应的过程中转动了一定的角度，如果没有原子尺度的原位实验观察是不可能发现这个现象的。”张泽院士说。

前沿与应用

科研两条腿走路

对科学家而言发现一个现象，理解其中的规律后，更重要的是利用得到的规律改造现实世界。

在实验中，浙大研究者发现当实验温度达到500摄氏度时，不同气氛环境下金颗粒可在两个角度间可逆转动而形成两种界面结构，如果在催化性能好的那个结构时把温度降下来，比如说降到室温，就可以“锁定”这个界面结构，在低温催化反应时展现优异的催化效率。王勇说：“这一发现为未来催化剂的设计提供了新思路，开拓了新的视野。而且，别的材料、别的反应的调控也可以从这个角度去思考。”

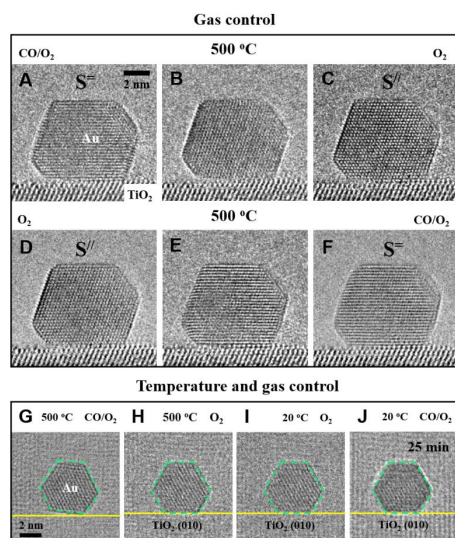


图3. 利用温度和气氛调控金-二氧化钛界面结构

与此同时，金颗粒二氧化钛催化剂对于消除一氧化碳、防止中毒和保护环境具有积极作用，这将为研发更廉价高效、安全稳定的催化剂打开一扇新窗户。

张泽院士在接受采访时说：“科学研究要‘两条腿走路’，一条走到世界前沿，发现新现象，找到新规律；另一条应服务国民经济发展，期望我们的科学发现能助力高效稳定催化剂的研发，这样才能为国解忧，为民造福。”

论文的第一单位为浙江大学，浙大材料科学与工程学院袁文涛博士为第一作者，中国科学院上海高等研究院朱倍恩博士、浙大材料学院博士生方珂为共同第一作者；浙江大学材料科学与工程学院、浙大电镜中心王勇教授为通讯作者，高崑研究员、Wagner教授、Hansen博士为共同通讯作者，浙大团队学术带头人张泽院士对此工作给予了重要指导和支持。此外，杨杭生教授、博士生李小艳和欧阳参与了该工作。

该工作得到了国家自然科学基金委、浙江省自然科学基金、教育部、中科院青促会、国家超级计算广州中心、上海超算中心、中国博士后基金、硅材料国家重点实验室的共同资助和支持。

原文链接：<https://science.sciencemag.org/content/371/6528/517>

（文 柯溢能 吴雅兰/摄影 卢绍庆）

总访问量：541225948

浙江大学新闻办公室主办 浙新办[2002]29号 未经许可，请勿转载

地址：浙江省杭州市西湖区余杭塘路866号，浙江大学紫金港校区东三105-9

Copyright© 2009 - 2020 <http://www.news.zju.edu.cn>