合肥研究院构筑出氮掺杂碳层调控镍催化剂 可实现高效室温水相加氢

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究员汪国忠团队在构筑氮掺杂碳层调控催化剂的性能研究中取得进展。该研究合成了封装于氮掺杂碳层和二氧化硅复合载体中的镍催化剂，探讨了催化剂的碳层、碳层厚度以及氮掺杂对香草醛水相加氢性能的影响。

水在绿色化学领域是环保且易得的溶剂，在化学反应中具有重要意义。然而，传统的催化剂在水相反应中面临着活性金属流失、浸出和失活等问题，进而影响催化效率和稳定性。该研究表明包覆式策略可以减少活性金属的损失。由间苯二酚-甲醛衍生的氮掺杂碳层能够在不影响反应传质的前提下，通过固有的疏水特性增强催化剂表面与气体分子以及有机反应物之间的亲和力，提高催化剂的加氢活性和稳定性。它是液相催化领域中具有潜力的包覆材料。

该研究将金属镍封装在氮掺杂的碳和二氧化硅复合两亲性载体（SiO2@Ni@NC）中，并将这一催化剂应用于香草醛的水相加氢反应。研究发现，SiO2@Ni@NC催化剂在水相反应中展现出优异的活性和稳定性，在室温下可实现香草醛到4-羟甲基-2-甲氧基苯酚的近100%转化，且在5次循环中活性没有明显降低。

这一高效催化性能得益于活性金属、氮掺杂碳层和SiO2之间的协同作用。其中，亲水性的SiO2内核使得催化剂可在水相中均匀分散，从而更好地与反应物接触。而氮掺杂的碳层则发挥了多重功效，即保护内部金属不被氧化或浸出，能够作为还原剂还原内部金属，并对活性金属进行电子改性。此外，该碳层能够通过富集H2和有机反应物来调节活性位点周围的微环境。

进一步，该研究通过密度泛函理论的计算证实了氮掺杂碳层在促进反应物吸附和氢气自发解离方面的作用，并阐明了香草醛水相加氢的催化机理。该工作提出的碳层包覆式策略，为构筑高效、稳定的室温水相加氢催化剂提供了新思路。

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

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/209919.html