



## 实验数据分析

本设备分析软件提供了金属分散度、活性表面积、平均晶粒大小三项催化剂指标表征数据分析模块，具体实验数据的获取及计算应用，请参照以下说明：

### 一、 金属分散度：

1. 定义：金属分散度指催化剂表面活性金属原子数与催化剂总金属原子数之比。

2. 应用公式：

$$D = \frac{n \times V_g \times M_M}{W \times P \times 22414} \quad (1)$$

式中：

D：催化剂金属分散度；

$n$ ：实际反应过程中分析气体的化学计量系数（对于氢氧滴定的化学计量式，不同文献给出了不同的结果，如氢滴定法测定氧在 Pt 上的化学吸附时，Pt 上的一个氧原子消耗两个氢原子而反应生成水，吸着在载体上；同时，由于 Pt 原子在脱氧后本身要吸附一个氢原子，所以，滴定吸附在 Pt 上的氧原子本身所用的氢量，仅为总消耗氢量的  $\frac{2}{3}$ ，亦即表面 Pt 原子数为消耗的 H<sub>2</sub> 分子数的  $\frac{2}{3}$ ，则该计量系数取  $\frac{2}{3}$ 。事实上到底采用哪种化学计量式及系数，必须由补充实验来决定。）

$M_M$ ：催化剂金属相对原子质量，单位 g/mol（克/摩尔）

$W$ ：被测样品质量，单位 g（克）

$P$ ：催化剂中活性金属的质量分数，%

3.  $V_g$  的计算：

$$V_g = \frac{NA_i - A_{II}}{A_i} \times V \quad (2)$$

式中：

$V_g$  表示实验过程中被完全氧化（或还原）的催化剂样品所消耗的分析气体（H<sub>2</sub> 或 O<sub>2</sub>）体积，单位 ml（毫升）；

$A_i$  空载时（无样品）注入一次分析气体脉冲，所引起的色谱峰面积（切峰操作详见软



件说明);

A II 脉冲滴定开始至滴定饱和时,分析仪器溢流所引起的色谱峰面积(切峰操作详见软件说明);

V 仪器脉冲定量管体积,单位 ml(毫升),仪器内置参数;

N 脉冲滴定开始至滴定饱和时,所注入的脉冲数。

## 二、 活性比表面积:

1. 定义:单位质量催化剂中,表面活性金属原子所具有的表面积。

2. 应用公式:

$$S = \frac{2 \times V_g \times N_0 \times \sigma_M}{W \times P \times 22414} \times 10^{-18} \quad (3)$$

式中:

S : 催化剂活性比表面积,单位  $\frac{\text{m}^2}{\text{g}}$  (平方米/克)

$V_g$  : 表示实验过程中被完全氧化(或还原)的催化剂样品所消耗的分析气体(H<sub>2</sub> 或 O<sub>2</sub>)体积,单位 ml(毫升);

$N_0$  : 阿伏伽德罗常数,  $6.02 \times 10^{23}$  个/mol

$\sigma_M$  : 催化剂金属原子横截面积,  $0.089 \text{ nm}^2$  (平方纳米)

W : 被测样品质量,单位 g(克)

P : 催化剂中活性金属的质量分数, %

## 三、 平均晶粒:

1. 定义:催化剂活性金属的平均颗粒大小(对于  $P_t$  的平均晶粒大小是在 Hughes 模型的基础上概算的。它的基本假设是:所有的  $P_t$  晶粒都是理想的,一样大小的立方体,它的一个面和载体接触,其余的五个面暴露着,立方体的一边长度 d 和表面积 S 及体积 V 或者密度  $\rho$  有关。)

2. 应用公式:



$$d = \frac{5 \times 10^{-4}}{\rho_M \times S} \quad (4)$$

式中：

$d$ ：催化剂金属平均晶粒，单位 Å（埃）

$S$ ：催化剂活性比表面积，单位  $\frac{\text{m}^2}{\text{g}}$ （平方米/克）

$\rho_M$ ：催化剂金属密度，单位  $\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ （克/立方厘米）

#### 四、 一些常见催化金属参数表：

序号	金属名称	元素相对原子质量 (g/mol)	原子横截面积 (nm <sup>2</sup> )	密度 (g/ml)
1	Pt（铂）	195.08	0.089	21.45
2	Pd（钯）	106.42	未知	12.02
3	Re（铼）	186.207	未知	21.04
4	Ru（钌）	101.07	未知	12.37
5	Ni（镍）	58.69	未知	8.9
6	Co（钴）	58.933	未知	8.9
7	Fe（铁）	55.84	未知	7.874
8	Ag（银）	107.868	未知	10.5
9	Cu（铜）	63.54	未知	8.96
10	Zn（锌）	65.38	未知	7.13

（一般只做 1-4 号贵金属计算）