

Учёные впервые измерили долю электрона в катализе — шаг, меняющий фундаментальную химию

Дата публикации: 08.10.2025

Одной из величайших загадок химии XX века оставался вопрос, как именно электроны участвуют в каталитических реакциях, определяя скорость и эффективность химических процессов. Теперь, спустя более века исследований, учёные из Центра программируемого энергетического катализа при Университете Миннесоты совместно с Инженерным колледжем Каллена при Университете Хьюстона впервые смогли измерить долю электрона, участвующую в этих реакциях. Это открытие не только решает фундаментальную научную проблему, но и прокладывает путь к созданию катализаторов нового поколения, способных радикально снизить затраты в производстве топлива, химикатов и материалов.

Катализаторы лежат в основе современной химии. Они ускоряют реакции и уменьшают затраты энергии, позволяя промышленности производить топливо, лекарства, удобрения, пластмассы и аккумуляторы. Более 90% всех промышленных химических процессов невозможно представить без катализаторов. Однако, несмотря на их колоссальную роль, до недавнего времени учёные не могли точно измерить, как электроны распределяются между реагирующими молекулами и поверхностью катализатора.

Новое исследование, опубликованное в журнале ACS Central Science, представило метод изопотенциального электронного титрования (IET, Isopotential Electron Titration), который позволяет напрямую измерять долю электрона, участвующего в взаимодействии между атомами реагентов и катализатором. Метод настолько чувствителен, что способен фиксировать обмен электронами на уровне менее одного процента.

Результаты оказались неожиданными. Учёные выяснили, что эффективность катализа определяется обменом ничтожно малых долей электрона. Например, атом водорода при связывании с платиной передаёт всего 0,2% своего электрона, и именно этот микроскопический обмен делает возможными миллионы промышленных реакций. Это объясняет, почему благородные металлы, такие как золото, серебро и платина, столь эффективны в катализе: они обеспечивают идеальный баланс электронного обмена, при котором реакция становится возможной, но остаётся контролируемой.

Ранее такие эффекты можно было изучать только косвенно — в упрощённых

моделях, не отражающих реальных условий. Теперь метод ИЕТ позволяет измерять взаимодействия в тех же средах, где происходят промышленные реакции, — при высоких температурах, давлениях и в сложных химических смесях. Это делает технологию универсальным инструментом для анализа и проектирования катализаторов будущего.

Теперь ИЕТ даёт возможность: (1) измерять долю электрона, участвующую в реакции; (2) сравнивать активность различных катализаторов; (3) прогнозировать стабильность материалов; (4) оценивать реакционную способность в реальном времени; (5) ускорять поиск новых соединений с помощью искусственного интеллекта.

Эти результаты открывают новые горизонты для разработки эффективных и экологичных технологий. В энергетике они помогут создать катализаторы для производства дешёвого «зелёного» водорода, для систем хранения энергии и для улавливания углекислого газа. В химической промышленности — улучшить процессы синтеза лекарств и биоматериалов.

Совмещение метода ИЕТ с машинным обучением и нанотехнологиями создаёт мощный инструмент для открытия новых веществ. Компьютерные модели, основанные на точных физических данных об электронном обмене, смогут прогнозировать, как будут вести себя миллиарды возможных структур. Это ускорит разработку катализаторов, которые станут фундаментом новой энергетической экономики.

Фактически ИЕТ можно рассматривать как «электронный микроскоп» нового поколения, который позволяет не просто наблюдать, но и количественно описывать взаимодействие на уровне долей электрона. Впервые человечество получило возможность буквально «увидеть», как электроны движутся между атомами, вызывая химические превращения, лежащие в основе жизни и технологий.

Открытие также подчёркивает роль фундаментальных исследований в формировании будущей промышленности. Понимание поведения электронов в катализе даёт учёным возможность проектировать материалы с заранее заданными свойствами, создавая основу для технологий, которые определяют энергетическую безопасность и устойчивое развитие в XXI веке.

Метод изопотенциального электронного титрования становится тем недостающим звеном, которое соединяет физику, химию и инженерные науки. Он делает возможным точное измерение самых малых взаимодействий, определяющих судьбу огромных химических систем. Теперь путь от фундаментальной науки до промышленного применения становится короче — и

яснее, чем когда-либо прежде.

Ссылка: «Изопотенциальное электронное титрование: перенос заряда между адсорбатом водорода и металлом» DOI: [10.1021/acscentsci.5c00851](https://doi.org/10.1021/acscentsci.5c00851).