中国科大提出拓扑量子催化新概念

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/26313.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！

中国科大提出拓扑量子催化新概念。近日，中国科学技术大学教授曾杰团队和王征飞团队合作，提出拓扑量子催化新概念。研究人员通过巧妙设计，将拓扑量子物态调控方案用于催化实验，为揭示催化反应中拓扑表面态开关效应提供了确凿的实验证据。相关成果日前发表于《美国化学会志》。

在多相催化中，反应物吸附、电子转移、中间体演变等过程对催化剂的表面环境高度敏感。拓扑材料的拓扑表面态受对称性保护，且不受局部扰动的影响。因而拓扑材料是研究催化反应中表面电子态效应的理想平台。

此次工作中，研究人员选择室温拓扑材料硒化铋为研究对象，设计两组对照实验探究电催化反应中的拓扑表面态开关效应：通过减小硒化铋厚度，在不改变催化剂表面结构的情况下，借助量子限域效应消除其拓扑表面态；对具有拓扑表面态的硒化铋施加强磁场，利用磁场引起的塞曼效应与轨道效应打破时间反演对称性，进而消除拓扑表面态。

理论研究发现，有拓扑表面态的硒化铋可以弱化关键中间体吸附，显著调控关键中间体界面行为。根据硒化铋的结构特性，研究人员构建出层厚分别为六纳米和两纳米的硒化铋模型催化剂。利用角分辨光电子能谱证实六纳米硒化铋存在拓扑表面态，而两纳米硒化铋不存在拓扑表面态。电催化实验研究表明，六纳米硒化铋二氧化碳电催化还原主要形成液态产物，而两纳米硒化铋易产生气态产物。当六纳米硒化铋在强磁场中电催化二氧化碳还原时，其催化性能随磁场强度变化逐步接近两纳米硒化铋性能。密度泛函理论研究发现，有拓扑表面态的硒化铋通过降低产生甲酸和草酸的速控步反应势垒，同时提高形成一氧化碳的速控步反应势垒，致使其更易形成液体产物。因此，开关拓扑表面态会显著调控二氧化碳电催化还原反应性能。

研究人员介绍，研究通过精准开关拓扑表面态，为凝练硒化铋拓扑表面态和二氧化碳电催化还原反应性能构效关系提供了直接实验证据，开辟出拓扑量子催化新方向。（来源：中国科学报 王敏）

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/jacs.3c11088

作者：曾杰等 来源：《美国化学会志》

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转发