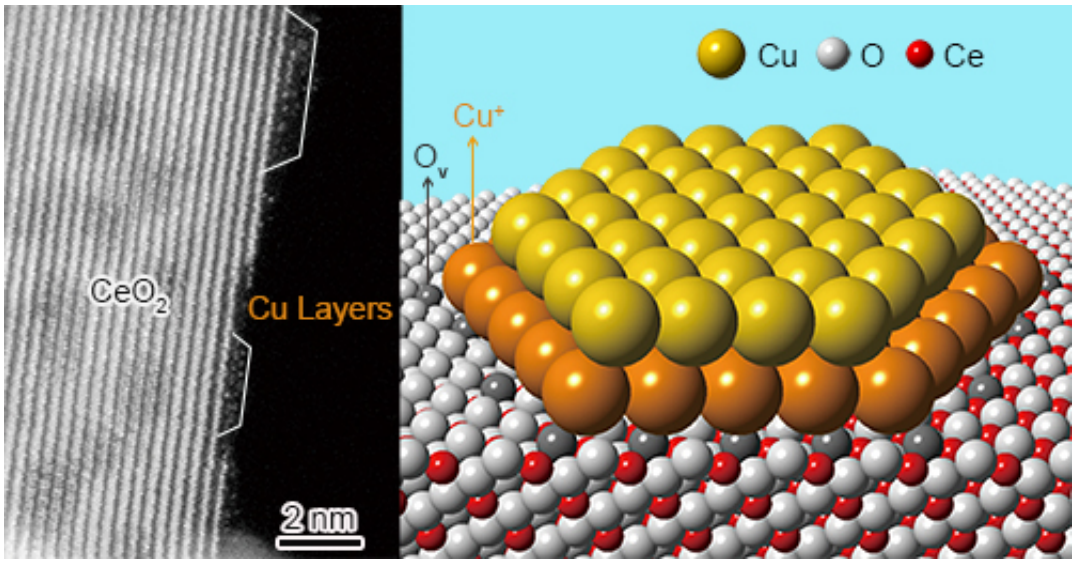
金属-载体界面结构研究取得新进展

作者：刘万生 周燕 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/4048.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！



金属-载体界面结构研究取得新进展。近日，中科院大连化物所催化基础国家重点实验室周燕副研究员、申文杰研究员等与德国卡尔斯鲁厄理工学院汪跃民教授、丹麦托普索公司Jens Sehested博士等合作，在铜催化剂活性位原子结构及反应机理研究方面取得重要进展。研究成果发表在《自然—催化》上。

Cu/CeO2催化剂在水气变换、合成甲醇等合成气化学反应中表现出优异性能，但对其活性位原子结构和催化机理还知之甚少。

研究团队利用球差较正扫描透射电镜(AC-STEM)和电子能量损失谱(EELS)表征了金属-载体界面原子结构和化学配位环境，发现铜原子簇主要呈现双层结构(bilayers)，界面铜原子的空间结构取决于其与氧化铈表层氧空穴之间的相互作用程度。此外，研究人员通过原位红外光谱等确定了铜原子的化学状态及氧化铈表面氧空穴分布;结合DFT计算，描述了界面铜原子向氧化铈电子转移过程及相互作用机制。并提出了copper bilayer模型概念，模型的上层为金属态铜原子(Cu0)，而下层为一价铜原子(Cu+)。研究中还发现水气变换反应的活性位为一价铜原子与邻近的氧化铈表面的氧空穴(Cu+-Ov-
Ce3+)：CO在一价铜表面吸附活化，而水分子则在邻近的氧化铈空穴位解离活化。

本项研究工作揭示了Cu/CeO2催化剂活性位的原子结构，为通过调控金属-
氧化物相互作用方式研制高活性催化剂提供了实验和理论基础。

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