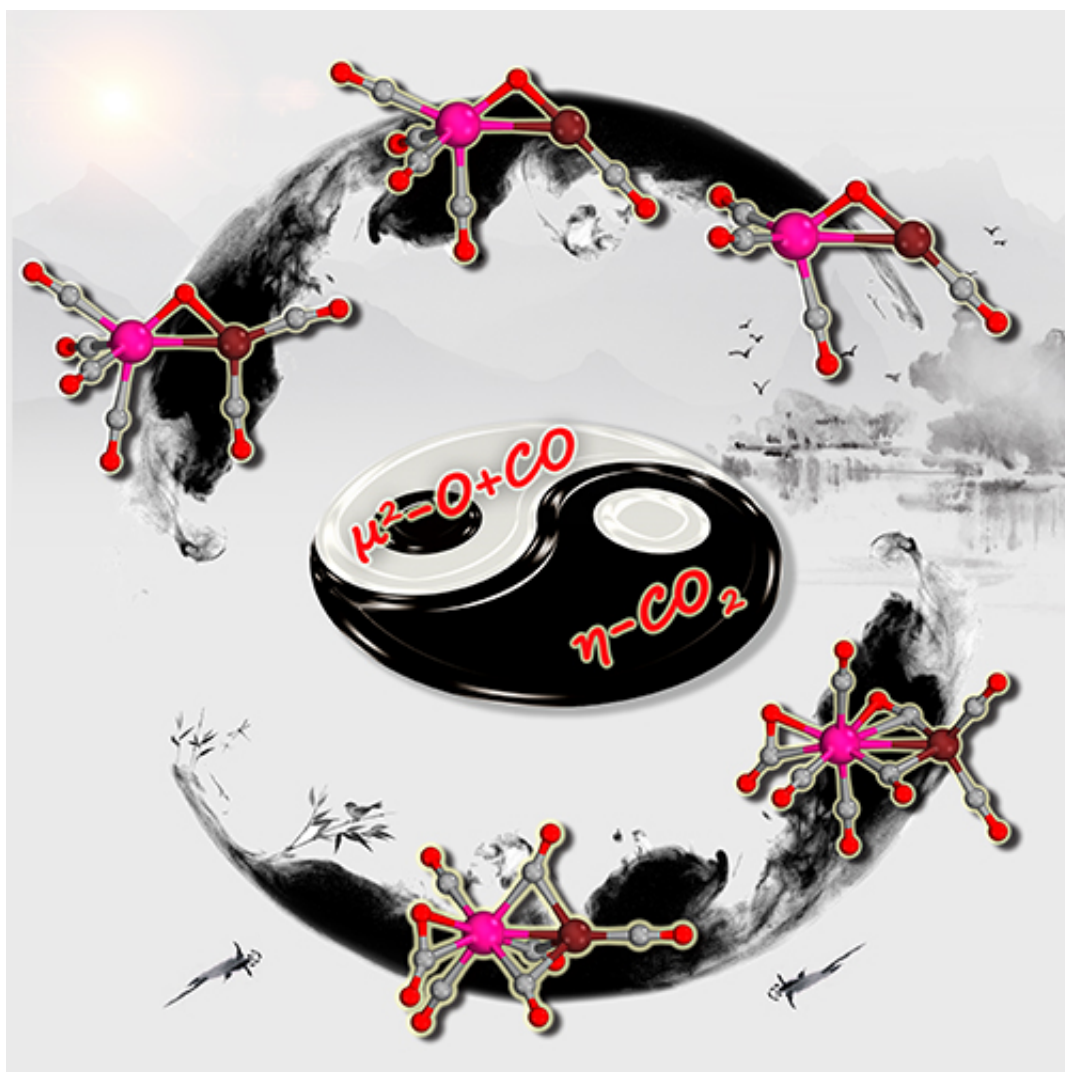


一氧化碳氧化反应机理研究取得新进展

作者：刘万生 谢华 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/4606.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！



一氧化碳氧化反应机理研究取得新进展。近日，中科院大连化物所分子反应动力学国家重点实验室团簇光谱与动力学研究组江凌研究员、谢华副研究员与山西师范大学化学与材料科学学院刘志凌副教授合作，在一氧化碳氧化机理研究中取得新进展，相关研究结果以Supplementary Journal Cover形式发表在The Journal of Physical Chemistry Letters上。

作为重要的原型反应之一，一氧化碳(CO)氧化反应在多相催化反应中引起了极大的关注。近期

研究表明，过渡金属氧化物对CO氧化有着很好的催化性能，外围氧的反应性比桥式氧更具竞争力。然而，共吸附CO分子对CO氧化的微观作用机制尚有待深入研究。利用团簇光谱实验方法，可从微观的原子分子尺度原位在线探测关键反应中间体，研究它们的尺寸大小、几何和电子结构、金属氧化价态等对反应活性和机理的影响，对揭示催化反应机理具有重要意义。

研究人员以铌镍单氧物的羰基配合物离子作为研究对象，发现共吸附CO配体对CO氧化起到了重要作用。利用自主研制的团簇质谱与光电子成像谱联用实验装置，成功探测到NbNiO(CO)_n-关键反应中间体。结果表明，在NbNiO的连续羰基化过程中，当n = 6时，CO配体端式配位到金属核上，金属单氧化物上的氧原子仍然保持桥氧形式；而当n = 7时，桥氧迁移至CO配体上形成CO₂配体，实现了CO氧化。

理论计算表明，连续吸附的CO配体一方面与桥氧竞争与金属核的化学成键，促进了氧迁移，另一方面促进了金属原子的电荷积累。本项研究加深了对一氧化碳氧化反应机理的认识。

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](http://www.iikx.com)转发