
单分子甲醛吸附研究取得新进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/5637.html>

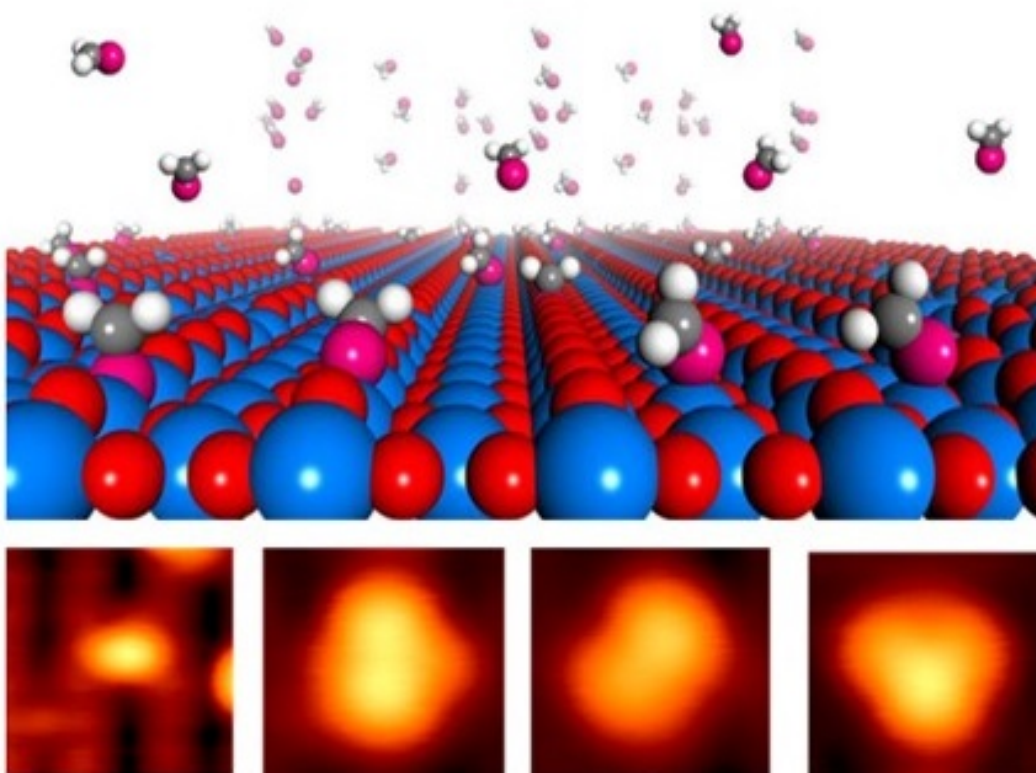
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

单分子甲醛吸附研究取得新进展。近日，中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室中科院院士杨学明、副研究员马志博与中国科学技术大学教授李微雪、浙江师范大学助理研究员黄传奇合作，在单分子层面甲醛在金红石型氧化钛110表面吸附结构研究中取得新进展，相关结果发表在The Journal of Physical Chemistry Letters上。

氧化钛110表面是研究光催化的模型体系，近年来结合小分子在其表面的行为研究揭示了一系列重要的基元动力学过程。但是这一体系在甲醛分子的研究中却存在困难，其主要原因在于理论预测和实验观测的吸附结构不同，这造成了一系列相互矛盾的实验结果无法被正确地理解。

结合高分辨的扫描隧道显微镜和高精度的密度泛函理论计算，研究得到了甲醛在氧化钛表面的轨道分辨。通过仔细地对比几种轨道分辨，科研人员发现了吸附结构经常处于叠加态中，既可以是不同物理吸附状态的叠加，也可以是物理吸附和化学吸附的叠加态。这预示着处于物理吸附和化学吸附的叠加态的吸附结构极有可能是物理吸附向化学吸附的转变通道，而同一类位点存在不同的叠加状态，则说明表面上看起来是同一种位点的吸附位，受到周围环境(如各种缺陷)的影响，也会在分子吸附结构上表现出根本性的不同。这些实验现象对于理解甲醛复杂的反应路径，以及理解前人相互矛盾的实验结果均有极大的帮助。

该工作得到中科院战略性先导科技专项(B类)项目、中科院前沿科学重点研究计划项目、科技部国家重点研发计划、国家自然科学基金项目等资助。



单分子甲醛吸附研究取得新进展

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