

## 我校一研究成果在国际顶级期刊《物理评论快报》上发表

发表日期: 2012-03-15 | 稿件来源: 化学与分子工程学院 | 文字作者: 化学学院 | 编辑: 单行线 | 访问量: 2172

我校化学与分子工程学院龚学庆教授课题组近期围绕金属氧化物构效关系开展了大量计算模拟研究工作, 目前取得了突破性进展, 相关论文“Adsorbate Induced Restructuring of  $\text{TiO}_2(011)-(2 \times 1)$  Leads to One-Dimensional Nanocluster Formation”发表在最新一期物理领域国际顶级期刊《物理评论快报》上(Phys. Rev. Lett. 108, 106105 (2012); <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.106105>)。

作为多相催化中的常见过程, 金属及金属氧化物催化材料在制备、使用以及保存过程中常会发生表面结构的重构, 消除表面一些结构稳定性较差的原子堆积方式使其趋于热力学稳定, 但同时也消除了与这些堆积方式相对应的结构(如悬挂键)催化活性, 对于以共价键结构框架为支撑的金属氧化物表面的影响尤为显著, 认为其重构过程是不可逆的, 并极大地削弱了表面活性。

龚学庆教授课题组在之前研究工作中确定了金红石二氧化钛(011)表面 $2'1$ 重构的具体方式(*Surf. Sci.* 603, 138-144 (2009)), 并指出重构的动力来自于表面悬挂键的消失。然而, 这一重构表面对于许多有机分子(如乙酸)却有很强的吸附活性, 这显然与重构消除活性的传统观点相矛盾。为此, 龚学庆教授课题组开展了大量的计算模拟研究, 发现这一 $2'1$ 重构表面实际上存在结构可变性, 通过整列结构单元的滑动变形, 产生高活性的表面原子, 而这一过程又必须在相应分子(如乙酸)吸附的诱导下才能发生。这一工作不仅是金属氧化物表面重构-活性关系理论方面的重要补充, 更为实验应用领域获得一维纳米线性结构体系提供了很好的思路。

### ■ 相关新闻

- |                                       |              |
|---------------------------------------|--------------|
| • 英国巴斯大学 Aron Walsh博士受邀来我校作学术报告       | [2011-09-20] |
| • 化学学院召开理论计算化学学术研讨会                   | [2011-09-20] |
| • 化学学院迎来化学和材料化学新专业评估                  | [2011-07-01] |
| • 化学学院童晓峰副教授课题组研究又取得重大进展              | [2011-05-25] |
| • 化学学院童晓峰副教授又一论文在J. Am. Chem. Soc.上发表 | [2011-04-21] |
| • 化学学院召开学风建设家长会                       | [2011-04-19] |
| • 化学学院青年教师刘培念副教授科研再次取得重要进展            | [2011-04-06] |
| • 化学学院三届二次教代会、工代会召开                   | [2011-03-15] |
| • 钱锋副校长赴化学学院调研“十二五”规划                 | [2011-01-21] |
| • 化学学院“华理志愿者体验周”活动结束                  | [2010-12-10] |