

应用广泛



石油精炼

加氢、脱氢、脱硫、
脱硝、重整 等



精细化学品

加氢、羰化、氨化
甲酰化反应等



环境催化

汽车尾气处理
VOCs 燃烧



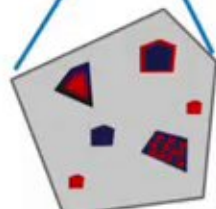
生物质转换

加氢脱氧、重整等

催化剂结构复杂多样，催化机制认识挑战巨大



单金属催化剂



双金属催化剂

多相催化
“黑盒子”

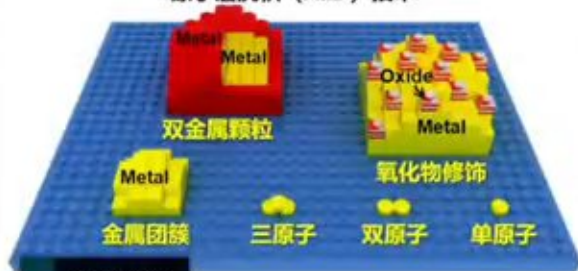


科学挑战

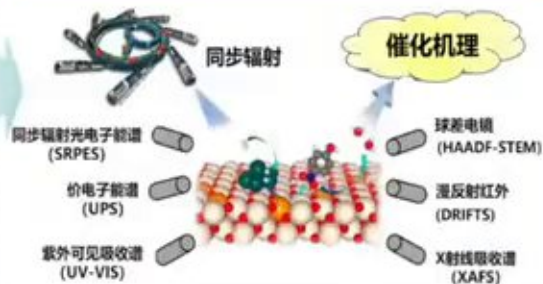
- 理解“构效”关系
- 认识催化反应机理
- 高效催化剂理性设计

“搭积木式” 催化剂原子精准设计

原子层沉积 (ALD) 技术



多方位原位谱学/显微学结构表征



- ◆ 原子尺度上研究催化剂设计的基础科学问题，**发展催化新理论**
- ◆ 理解催化反应构效关系，揭示反应分子机制，**创制高效催化剂**

Acc. Mater. Res. 3 (2022) 358

Acc. Chem. Res. 46 (2013) 1806

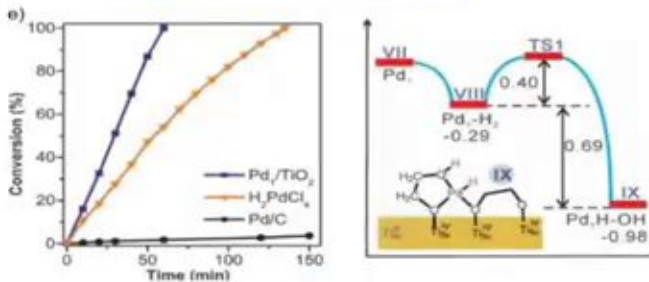
Surf. Sci. Rep. 71 (2016) 410-472

3

- 金属-载体相互作用与单原子催化
- 金属-氧化物界面催化

配位结构与单原子催化

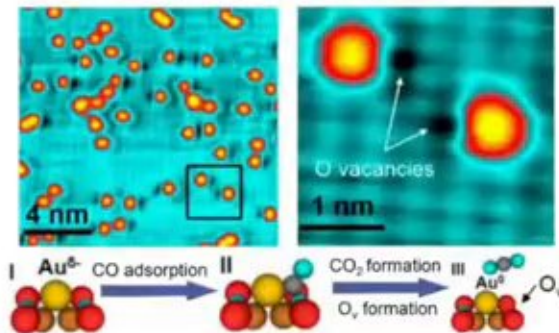
Pd₁/TiO₂ 催化苯乙烯加氢



在加氢反应中，配位原子促进H₂分子活化

N.F. Zheng, et al., *Science* 352, 2016, 797-800

Au₁/CuO催化的CO氧化



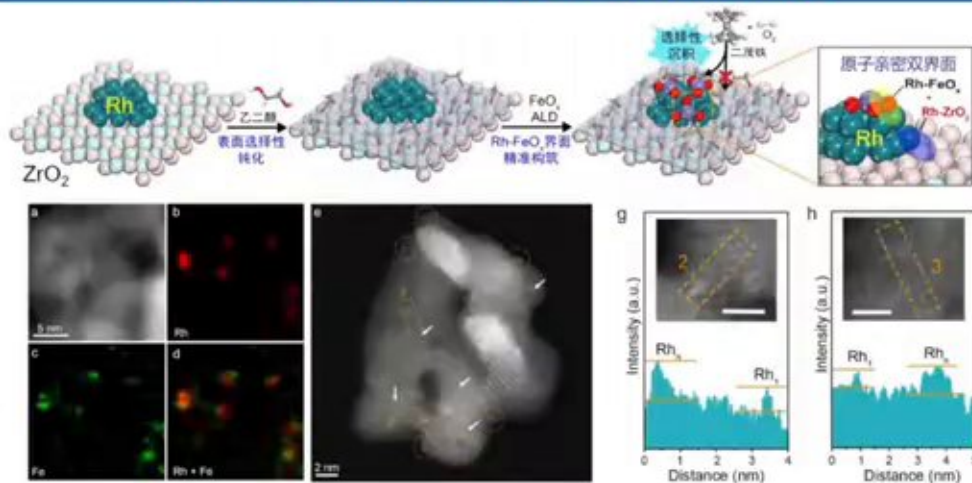
利用STM观察到配位晶格氧通过
MvK机理参与CO氧化反应

K. Wu, et al., *J. Am. Chem. Soc.* 140, 2018, 554-557

如何理解实验中频繁出现的
“高价态-高稳定性-高活性”与“低价态-高稳定性-高活性”
之间的矛盾现象？



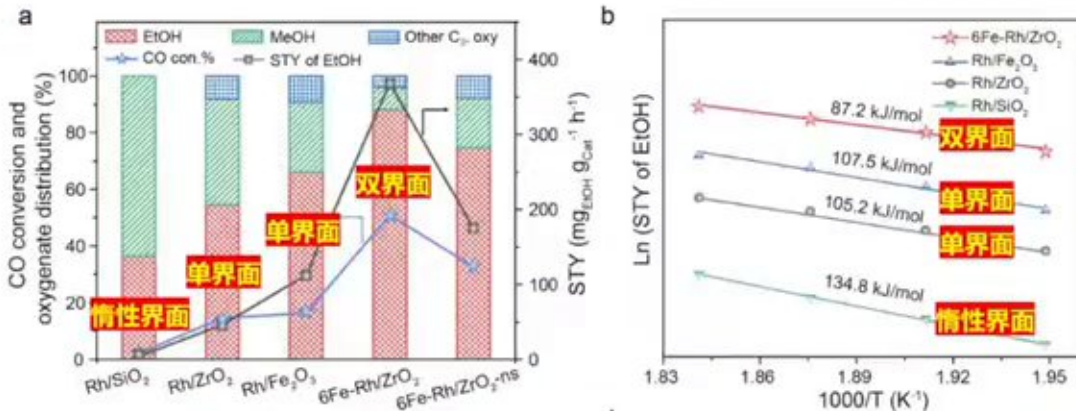
双界面协同串联催化合成气制乙醇



ZrO_2 负载的**二维Rh团簇**表面精准沉积 FeO_x 物种，构筑原子亲密 FeO_x -Rh-ZrO₂双界面

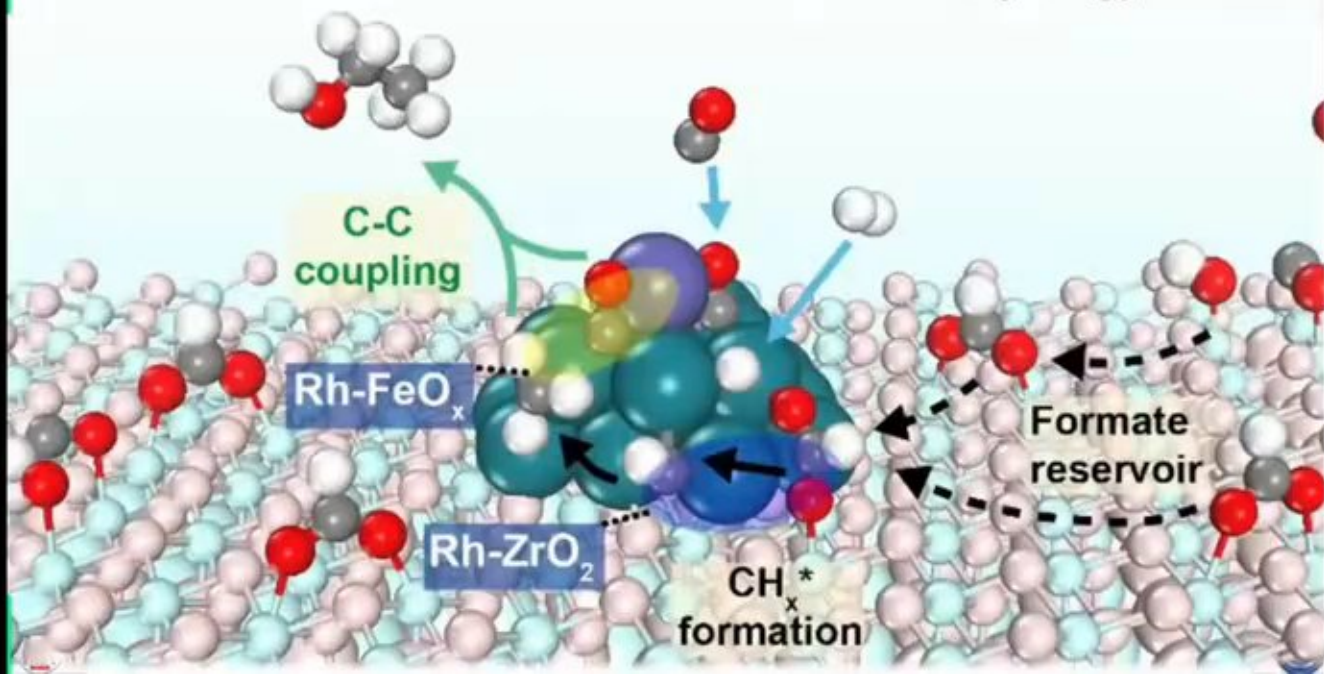
H.W. Wang*, J.X. Liu*, J.L. Lu*, et al., *Nat. Nanotechnol.* 20 (2025) 255-264

双界面协同串联催化合成气制乙醇

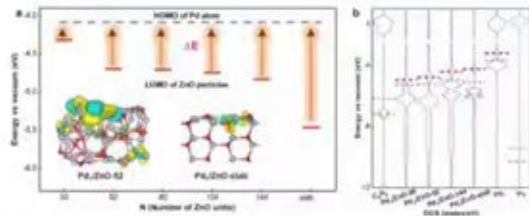


H.W. Wang*, J.X. Liu*, J.L. Lu.* *Nat. Nanotechnol.* 20 (2025) 255-264

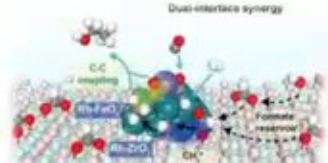
Dual-interface synergy



- ◆ 单原子催化剂中，金属原子-载体相互作用本质是金属与载体前线轨道之间的耦合。前线轨道理论为描述单原子催化剂的活性与稳定性提供了一个统一的理论模型



- ◆ 构筑原子亲密，功能互补的双界面，有助于实现界面协同串连催化，调控催化反应路径



课题组成员

特任副研究员/博士后

曹丽娜 王恒伟 古健
关桥桥 刘馨雨 王雷雷

博士生

徐余幸 蔡立华 徐文龙
徐璐璐 孙杞梦 金瑞
张梦凯

硕士生

李胤 刘天乐 聂函
丁佳妮 张武岳 李雨真
林结诚 周静 孙逊



合作者

韦世强 教授 (XAFS)
杨金龙 教授 (理论)
李微雪 教授 (理论)
武晓君 教授 (理论)

周武 教授 中国科学院大学 (TEM)

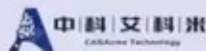
杨冰 研究员 大连化物所 (XPS/TEM)

杨永 教授 上海科技大学 (XPS)

郇庆 研究员 中科院物理所 (仪器搭建)

Prof. Jonas Weissenrieder at KTH

Prof. Hans-Joachim Freund at FHI



基金:

